



Ulisses do Espírito Santo Loureiro

Licenciado em Ciências da Engenharia Física

Cálculo dos Efeitos de Interferência Quântica em Íões Altamente Carregados

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Física

Orientador: Pedro Manuel Duarte Gonçalves Amaro,
Prof. Auxiliar Convidado,
Universidade Nova de Lisboa

Co-orientador: José Paulo Moreira dos Santos,
Prof. Associado com Agregação,
Universidade Nova de Lisboa

Júri

Presidente: Prof. Doutora Maria Isabel Simões Catarino
Arguente: Prof. Doutor José Manuel Pires Marques
Vogal: Prof. Doutor Pedro Manuel Duarte Gonçalves Amaro



FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Maio, 2017

Cálculo dos Efeitos de Interferência Quântica em Iões Altamente Carregados

Copyright © Ulisses do Espírito Santo Loureiro, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade NOVA de Lisboa.

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade NOVA de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Dedicado ao meu pai, Gustavo Loureiro.

Agradecimentos

A caminhada ao longo de todo este trajecto e a conclusão do mesmo só foi possível com o apoio de todos aqueles que me acompanharam, por este motivo gostaria de deixar aqui expresso o meu sincero agradecimento:

A todos os docentes e funcionários da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa que ao longo destes anos curriculares tão bem me receberam e que de forma directa ou indirecta contribuíram para o meu desenvolvimento pessoal.

Ao Professor Doutor José Paulo dos Santos por ter aceite que este trabalho fosse realizado no seu grupo de investigação e pelas sugestões que permitiram melhorar o trabalho realizado.

Ao Professor Doutor Pedro Amaro pelos conhecimentos transmitidos, compreensão e disponibilidade que sempre demonstrou.

À Ariela.

Ao meu irmão Paulo pela companhia sempre agradável.

Ao meu pai, por tudo.

Resumo

Os efeitos de interferência quântica (IQ) em espectroscopia *laser* ocorrem quando a energia de separação entre estados quânticos é da ordem de grandeza da largura a meia altura das transições em estudo. Estes efeitos dependem do método experimental utilizado [1] e podem causar o desvio das frequências de ressonância nos espectros obtidos por espectroscopia *laser* de alta resolução. Neste contexto, verifica-se que a energia de separação da estrutura hiperfina do nível $2p_{3/2}$ é da ordem de grandeza da largura a meia altura do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ em iões do tipo lítio altamente carregados, isto é, iões com apenas três electrões e carga nuclear ($Z > 20$). Por este motivo os efeitos de IQ são espectáveis neste tipo de transições em iões do tipo lítio altamente carregados, tornando-se assim pertinente a realização do cálculo dos efeitos de IQ neste tipo de iões.

Assim, com o objectivo de se calcular os efeitos de IQ em iões altamente carregados do tipo lítio, estendeu-se o estudo realizado em átomos muónicos [1, 2] a este sistema atómico. Este cálculo teve como base um método multipolar e relativista. Concluiu-se que para os casos em estudo neste trabalho o desvio das frequências de ressonância devido aos efeitos de IQ são mensuráveis, com um valor máximo de 6.5% da largura da transição em estudo para o $^{181}\text{Ta}^{70+}$. Verificou-se também que o carácter relativista dos iões altamente carregados causa um acréscimo da amplitude da secção eficaz diferencial, com um acréscimo máximo para o caso do $^{209}\text{Bi}^{80+}$ onde o valor da secção eficaz diferencial relativista é 40.2 vezes superior a secção eficaz diferencial não-relativista. Os resultados obtidos evidenciam uma independência entre o carácter relativista dos iões altamente carregados e os efeitos de interferência quântica. E que através da parametrização da geometria do processo de dispersão é possível identificar um ângulo de polarização que permite minimizar os efeitos de interferência quântica. Por último, identificou-se que os efeitos de IQ das transições em estudo são da ordem de grandeza da contribuição electrodinâmica quântica (EDQ), demonstrando-se assim a importância da análise dos efeitos de IQ em futuros estudos experimentais das contribuições de EDQ por meio de espectroscopia *laser* de iões altamente carregados do tipo lítio.

Palavras-chave: Espectroscopia Laser; Física atómica; Interferência quântica; Iões altamente carregados.

Abstract

The effects of the quantum interference (QI) in laser spectroscopy occur when the separation energy between quantum states is of the order of magnitude in the natural linewidth of the transitions under study. These QI effects depend on the experimental method [1] and can cause the shift of the frequencies on high resolution laser spectroscopy. In this context, it is shown that the hyperfine structure energy separation of $2p_{3/2}$ level have the same order of magnitude of $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ linewidth transition in lithiumlike highly charged ions, that is, ions with only three electrons and nuclear charge ($Z > 20$). For this reason, the QI effects are expected in this type of transitions in lithiumlike highly charged ions, it is therefore pertinent to perform the calculation of QI effects on this ions.

Therefore, with the purpose of calculating the QI effects in highly charged lithiumlike ions, the treatment of the QI shifts performed to muonic atoms in references [1, 2] was extended to this atomic system. The computational calculation of QI effects was made with a full relativistic and multipole framework. It was concluded that for the cases study in this work, that the QI shifts is observed for some transitions, with a maximum value of 6.5% of natural linewidth for $^{181}\text{Ta}^{70+}$. Additionally, the relativistic highly charged ions increases the differential cross section, by a factor of 40.2 for $^{209}\text{Bi}^{+80}$ when compared with non-relativistic case. The obtained results evidences an independence between the relativistic effects and QI shifts. And it has been verified that by parameterizing the geometry of the dispersion process it is possible to identify an angle of polarization that allows minimizing the quantum interference effects. Finally, it has been verified that the QI effects of the transitions under study are in the order of the quantum electrodynamics (QED) contribution, thus demonstrating relevance of QI effects in future experimental investigations of QED contributions by lithiumlike highly charged ion laser spectroscopy.

Keywords: Laser Spectroscopy; Atomic Physics ; Quantum interference ; Highly charged ions.

Índice

Lista de Figuras	xv
Lista de Tabelas	xvii
Lista de Símbolos	xix
Acrónimos e Abreviaturas	xxv
1 Introdução	1
1.1 Objectivos	1
1.2 Enquadramento	2
1.3 Modelo de dispersão adoptado	3
1.4 Contexto experimental	5
1.4.1 Efeito Doppler relativístico	5
1.4.2 Casos de estudo	6
2 Fundamentação teórica	9
2.1 Momento angular	9
2.1.1 Operador momento angular	9
2.1.2 Harmónicos esféricos	9
2.1.3 Adição de momentos angulares	11
2.2 Secção eficaz diferencial	12
2.2.1 Interacção entre a radiação e a matéria	12
2.2.2 Operador de dispersão	13
2.2.3 Estados ressonantes e não-ressonantes	15
2.2.4 Expansão multipolar	16
2.2.5 Cálculo dos elementos de matriz relativos à amplitude de transição	18
2.2.6 Secção eficaz diferencial relativa aos estados ressoantes e não-ressonantes	21
3 Cálculo computacional	23
3.1 Cálculo das energias dos níveis da estrutura fina e hiperfina	24
3.2 Dependência angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ)	25
3.3 Cálculo dos coeficientes de parametrização angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ)	26
3.4 Cálculo dos efeitos de interferência quântica	26

4	Discussão de resultados	29
4.1	Comparação entre a secção eficaz diferencial relativista e a secção eficaz diferencial não-relativista	29
4.2	Dependência angular dos termos de interferência quântica	33
4.3	Desvios das energias de ressonância da secção eficaz diferencial para iões com o mesmo spin nuclear	37
4.4	Efeitos de interferência quântica em ressonâncias energeticamente distantes	40
4.5	Contribuição dos diferentes termos multipolares na amplitude da secção eficaz diferencial	42
4.6	Validade e correcção do cálculo realizado	43
4.7	Relevância dos efeitos de interferência quântica na secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$	43
5	Conclusões finais	45
	Bibliografia	47
A	Apêndice - Caracterização da estrutura hiperfina	51
A.1	$^{165}\text{Ho}^{64+}$	51
A.2	$^{175}\text{Lu}^{68+}$	52
A.3	$^{181}\text{Ta}^{70+}$	52
A.4	$^{185}\text{Re}^{75+}$	53
A.5	$^{209}\text{Bi}^{80+}$	53
B	Apêndice - Coeficientes de parametrização angular	55
B.1	$^{165}\text{Ho}^{64+}$	55
B.2	$^{181}\text{Ta}^{70+}$	56
B.3	$^{175}\text{Lu}^{68+}$	56
B.4	$^{185}\text{Re}^{72+}$	57
B.5	$^{209}\text{Bi}^{80+}$	57
C	Apêndice - Rotinas <i>Matematica</i>[®]	59
C.1	Rotina <i>Deltafunc</i>	59
C.2	Rotina <i>Thetafunc</i>	60
C.3	Rotina - <i>OmegaDra</i>	61
C.4	Rotinas - <i>LambdafunDrake</i> e <i>XifunDrake</i>	62
C.5	Rotina <i>Tablecoef</i>	63
D	Apêndice - Base de dados	65
D.1	Tabelas	66
D.2	Relações	66
E	Apêndice - Rotinas Python	67
E.1	Função - <i>CrossSection</i>	67
E.2	Função - <i>ShiftCrossSec</i>	68

Lista de Figuras

1.1	Processo de dispersão	3
1.2	Geometria de dispersão	4
1.3	Esquema de montagem experimental	5
2.1	Adição de momentos angulares	12
2.2	Digrama de Feynman do processo de dispersão em estudo	14
2.3	Esquema ilustrativo do processo de interferência quântica	15
2.4	Transições multipolares permitidas	16
2.5	Comparação dos elementos de matriz radiais relativistas com os elementos de matriz radiais não-relativistas	21
3.1	Diagrama da implementação computacional	23
3.2	Parametrização da dependência angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ)	25
4.1	Secção eficaz diferencial relativista e não-relativista do $^{151}\text{Eu}^{60+}$	30
4.2	Razão entre a amplitude da secção eficaz diferencial relativista e a amplitude da secção eficaz diferencial não-relativista.	31
4.3	Amplitude da secção eficaz diferencial relativista e não-relativista.	32
4.4	Comparação dos desvios de interferência quântica observados na secção eficaz diferencial relativista e não-relativista.	32
4.5	Valor máximo do desvio das energias de ressonância dos iões em estudo para um ângulo de polarização do fóton incidente $\chi_1 = 0^\circ$ e um ângulo de dispersão $\theta_2 = 90^\circ$	33
4.6	Ângulo mágico de polarização do fóton incidente - I	34
4.7	Ângulo mágico de polarização do fóton incidente - II	34
4.8	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, ($\chi_1 = 0^\circ$)	35
4.9	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, ($\chi_1 = 90^\circ$)	35
4.10	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, ($\chi_1 = 55.6^\circ$)	36
4.11	Valor percentual dos desvios das energias de ressonância da secção eficaz diferencial de iões com o mesmo spin nuclear	37
4.12	Razão entre a energia de separação dos níveis da estrutura hiperfina e a largura a meia altura do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$	37
4.13	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{165}\text{Ho}^{64+}$	38
4.14	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{175}\text{Lu}^{68+}$	38

4.15	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{181}\text{Ta}^{70+}$	39
4.16	Soma dos termos coerentes e incoerentes da secção eficaz diferencial do $^{151}\text{Eu}^{60+}$	40
4.17	Elementos de matriz radiais relativistas	42
C.1	Fluxograma rotina - <i>Thetafunc</i>	60
C.2	Fluxograma rotina - <i>OmegaDra</i>	61
C.3	Fluxograma rotina - <i>LambdafunDrake</i>	62
C.4	Fluxograma da função - <i>XifunDrake</i>	63
C.5	Fluxograma da função - <i>Tablecoef</i>	63
D.1	Diagrama do modelo relacional da base de dados	65
E.1	Fluxograma da função - <i>CrossSection</i>	67
E.2	Fluxograma da função - <i>ShiftCrossSec</i>	68

Lista de Tabelas

1.1	Parametrização da geometria de dispersão.	4
1.2	Casos de estudo.	6
2.1	Valores dos coeficientes de Wigner $3J$ e $6J$ para transições $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_v}$, para um ião com spin nuclear $I = 9/2$	19
4.1	Coeficientes de parametrização da secção eficaz diferencial do $^{151}\text{Eu}^{60+}$	30
4.2	Desvios de interferência quântica na secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$	36
4.3	Desvios de interferência quântica na secção eficaz diferencial do $^{151}\text{Eu}^{60+}$	41
4.4	Caracterização da estrutura hiperfina do $^{151}\text{Eu}^{60+}$	41
4.5	Tabela comparativa dos valores de referência da largura a meia altura e da energia de transição ΔE_{FS} ($2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$) do $^{209}\text{Bi}^{80+}$	43
4.6	Contribuições da teoria EDQ em transições $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ do $^{209}\text{Bi}^{80+}$	44
A.1	Caracterização da estrutura hiperfina do $^{165}\text{Ho}^{64+}$	51
A.2	Caracterização da estrutura hiperfina do $^{175}\text{Lu}^{68+}$	52
A.3	Caracterização da estrutura hiperfina do $^{181}\text{Ta}^{70+}$	52
A.4	Caracterização da estrutura hiperfina do $^{185}\text{Re}^{75+}$	53
A.5	Caracterização da estrutura hiperfina do $^{209}\text{Bi}^{80+}$	53
B.1	Coeficientes de parametrização da secção eficaz diferencial do $^{165}\text{Ho}^{64+}$	55
B.2	Coeficientes de parametrização da secção eficaz diferencial do $^{181}\text{Ta}^{70+}$	56
B.3	Coeficientes de parametrização da secção eficaz diferencial do $^{175}\text{Lu}^{68+}$	56
B.4	Coeficientes de parametrização da secção eficaz diferencial do $^{185}\text{Re}^{72+}$	57
B.5	Coeficientes de parametrização da secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$	57

Lista de Símbolos

$\vec{A}(\mathbf{r}, t)$	Potencial vector.
A_{EHF}	Constante dipolar magnética da estrutura hiperfina.
a_{cor}	Factor de correcção relativista.
a_{LM}^{λ}	Potenciais multipolares.
b_{cor}	Factor de correcção de primeira ordem relativo à interacção electrónica.
B_{EHF}	Constante quadripolar eléctrica da estrutura hiperfina.
c	Velocidade da luz no vácuo.
e	Carga do electrão.
F	Momento angular total relativo à soma do momento angular total do electrão com o momento angular total nuclear.
\hat{H}_0	Hamiltoniano não perturbado.
\hat{H}_I	Hamiltoniano de interacção.
\hat{H}_T	Hamiltoniano total.
\hbar	Constante de Planck reduzida.
I	Momento angular total nuclear.
J	Momento angular relativo à soma do momento angular orbital com o momento angular intrínseco do electrão.

\vec{k}	Vector de onda.
L	Ordem multipolar.
ℓ	Número quântico orbital de um electrão.
m	Número quântico magnético.
M	Número quântico magnético total.
$\bar{M}_{f,i}$	Elementos de matriz radiais.
\mathcal{M}	Amplitude de transição.
m_e	Massa do electrão.
m_p	Massa do protão.
\hat{m}_i	Operador de aniquilação.
n	Número quântico principal.
\hat{n}_i	Operador de criação.
$P(r)$	Solução radial da equação de Dirac (componente maior).
$P_{i \rightarrow f}$	Distribuição de probabilidade de transição do electrão.
P_n	Polinómio de Legendre de ordem n .
\hat{p}	Operador do momento linear.
$Q(r)$	Solução radial da equação de Dirac (componente menor).
\hat{r}	Operador de posição.
\vec{r}	Vector de posição.
\hat{S}^n	Operador de dispersão de ordem n .

s	Momento angular intrínseco do electrão.
$V(\mathbf{r})$	Potencial nuclear.
X	Ião no estado fundamental.
X^*	Ião no estado excitado.
$Y_{\ell,m}$	Harmónicos esféricos.
\vec{Y}_{LLM}	Vector harmónico esférico.
Z	Número atómico.
$\bar{\alpha}$	Matriz de Dirac.
α	Constante da estrutura fina.
Γ	Largura a meia altura.
γ_i	Fotão incidente ($i = 1$) ou emitido ($i = 2$).
ΔE_{EHF}	Energia de separação da estrutura hiperfina.
ΔE_{FS}	Energia da transição $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$.
$\bar{\delta}$	Desvio da energia de ressonância no espectro da secção eficaz diferencial.
δ_{cor}	Factor de correcção relativo à distribuição da carga nuclear.
$\delta_{i,J}$	Delta de Dirac.
ϵ_{cor}	Factor de correcção relativo à magnetização nuclear.
$\vec{\epsilon}$	Vector de polarização.
ϵ_0	Permitividade do vácuo.
θ	Ângulo polar.

$\Theta_{\ell,m}$	Dependência dos harmónicos esféricos $Y_{\ell,m}$ com o ângulo polar θ .
$\Theta_{L_1 L_2}^{\lambda_1, \lambda_2}$	Somatório dos harmónicos esféricos relativos à expansão multipolar do fóton incidente e do fóton emitido.
κ	Número quântico relativista.
Λ	Termos incoerentes relativos à soma das probabilidades de transição dos estados ressonantes.
μ	Momento magnético nuclear.
μ_N	Magnetão nuclear.
$\hat{\Pi}$	Operador de paridade.
π_i	Paridade nível i .
σ	Secção eficaz.
ς	Ângulo de parametrização dos termos incoerentes Λ e dos termos de interferência quântica Ξ .
ϕ	Ângulo azimutal.
$\Phi_{\ell,m}$	Dependência dos harmónicos esféricos $Y_{\ell,m}$ com o ângulo azimutal ϕ .
χ	Ângulo de polarização.
Ξ	Termos de interferência quântica relativos aos efeitos de interferência quântica associados aos estados não ressonantes.
χ_μ	Spinor do electrão.
Ψ	Função de onda do ião.
Ω	Ângulo sólido.
ω_i	Frequência de oscilação associada à energia do estado i .

ω_L Frequência da radiação de excitação.

$\omega_{\nu i}$ Frequência de oscilação relativa à transição do estado i para o estado ν .

Acrónimos e Abreviaturas

CREMA	Charge Radius Experiment with Muonic Atoms.
EAR	Experiências de Alta Resolução.
EBIT	Electron Beam Ion Trap.
ECRIS	Electron Cyclotron Resonance Ion Sources.
EDQ	Electrodinâmica Quântica.
EF	Estrutura Fina.
EHF	Estrutura Hiperfina.
EL	Espectroscopia Laser.
FAIR	Facility for Antiproton and Ion Research.
FWHM	Full Width Half Maximum.
IAC	Iões Altamente Carregados.
IQ	Interferência Quântica.
LIBPhys	Laboratório de Instrumentação, Engenharia Biomédica e Física das Radiações.
SIE	Sequência Isoelectrónica.
SQL	Structured Query Language.

U.A Unidades Arbitrárias.

Regras usadas

- Conjugados são representados por (\dagger) : A^\dagger .
- Índices ν e $n\nu$ representam transições/estados ressonantes e não-ressonantes, respectivamente.
- Operadores são representados por acento circunflexo : \hat{L}, \hat{S} .
- Vectores são representados por: $\vec{k}, \vec{\epsilon}$.
- Produtos escalares entre dois vectores são representados por (\cdot) : $\vec{\epsilon} \cdot \vec{k}$.
- Produtos externos entre dois vectores são representados por (\times) : $\vec{\epsilon} \times \vec{k}$.
- Versores são representados em negrito (do inglês "bold") : $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{\epsilon}$.

Introdução 1

1.1 Objectivos

Pretendeu-se com o presente trabalho aplicar a metodologia de estudo dos efeitos de interferência quântica em átomos muónicos realizado nas referências [1, 3], de modo a calcularem-se os efeitos de interferência quântica relativos aos decaimentos da estrutura hiperfina do nível $2p_{3/2}$ em iões altamente carregados da sequência isoelectrónica do lítio.

Para a concretização deste trabalho foram seguidas as seguintes etapas:

- Estudo do código implementado por Amaro *et al.* para o cálculo dos efeitos de interferência quântica em átomos muónicos [1, 3].
- Reestruturação do código implementado por Amaro *et al.* para o cálculo dos efeitos de interferência quântica em átomos muónicos [1], com o objectivo de calcular os coeficientes de interferência quântica relativos aos decaimentos da estrutura hiperfina do nível $2p_{3/2}$ em iões da sequência isoelectrónica do lítio.
- Identificação e caracterização da energia de separação da estrutura fina e hiperfina dos iões em estudo.
- Implementação computacional de um código em Python para o cálculo da secção eficaz diferencial.
- Análise e discussão dos resultados obtidos.

1.2 Enquadramento

Com os avanços da espectroscopia *laser* em iões altamente carregados [4, 5, 6, 7, 8] e respectivos melhoramentos na determinação do comprimento de onda [9] e potência emitida [9], em conjunto com o desenvolvimento de ferramentas de investigação como o *Electron Beam Ion Trap* (EBIT) [10, 11], ou o *Electron Cyclotron Resonance Ion Sources* (ECRIS) [12], tornou-se possível a realização de experiências de alta resolução (EAR) em iões altamente carregados (IAC) [10, 11, 13, 14, 15]. A análise deste tipo de iões tem aplicação no desenvolvimento de dispositivos de computação e metrologia quântica [10, 16] e no diagnóstico de plasmas de interesse astrofísico [17, 18]. Os iões altamente carregados com uma estrutura electrónica semelhante à do hidrogénio apresentam uma maior sensibilidade às diferentes contribuições da teoria electrodinâmica quântica (EDQ) [19]. Por este motivo, os iões altamente carregados do tipo lítio permitem o teste e a validação da teoria EDQ [20, 21, 22]. Neste contexto, a sequência isoelectrónica do lítio tem sido matéria de estudo por diversos autores [13, 20, 23, 24, 25]. Mais recentemente, no âmbito do desenvolvimento do futuro acelerador de iões pesados (SIS-300), pertencente ao *Facility for Antiproton and Ion Research* (FAIR) [26, 27, 28] em Darmstadt, Alemanha, confirmou-se a viabilidade de medição das energias de transição dos níveis da estrutura hiperfina de iões da sequência isoelectrónica do lítio [26]. O esquema de montagem proposto pelo FAIR prevê a possibilidade de identificar a estrutura hiperfina associada ao nível $2p_{3/2}$ com uma incerteza de medição ($\Delta\omega/\omega$) entre 5×10^{-5} e 5×10^{-8} .

Contudo, em experiências de espectroscopia *laser* de alta resolução podem ocorrer interferências entre os decaimentos dos diferentes estados quânticos que provocam desvios e assimetrias no ajuste do perfil dos espectros de ressonância [1, 2, 29, 30]. Estes desvios nos espectros de ressonância são usualmente conhecidos como efeitos de interferência quântica e ocorrem quando a energia de separação entre dois níveis excitados é da ordem de grandeza da largura do decaimento de um desses níveis. Os efeitos de interferência quântica foram já alvo de estudo por diferentes autores [1, 2, 30, 31, 32]. Nomeadamente, no âmbito da colaboração entre o Laboratório de Instrumentação, Engenharia Biomédica e Física das Radiações (LIBPhys) e o *Charge Radius Experiment with Muonic Atoms* (CREMA), com o objectivo de avaliar-se em que medida os efeitos de interferência quântica podem influenciar a determinação de propriedades nucleares como o raio do protão [33], calcularam-se os efeitos de IQ em átomos muónicos [1], concluindo que para os casos em estudo os efeitos de interferência quântica podem representar até um máximo de 10% da largura da transição para um detector pontual. Adicionalmente, verifica-se que para os iões do tipo lítio altamente carregados, a energia de separação da estrutura hiperfina do nível ($2p_{3/2}$) é da ordem de grandeza da largura das transições $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. Uma vez que não se identificou na literatura disponível estudos relativos aos efeitos de interferência quântica em iões do tipo lítio altamente carregados, mostrou-se pertinente o estudo dos efeitos de interferência quântica neste tipo de sistema atómico.

1.3 Modelo de dispersão adoptado

O estudo dos efeitos de interferência quântica realizado no presente trabalho baseou-se num modelo de dispersão elástico [34] e ressonante a dois fótons [19, 40]. O primeiro fóton corresponde a radiação incidente e o segundo fóton corresponde a radiação emitida. Este processo de dispersão encontra-se esquematizado na Figura 1.1

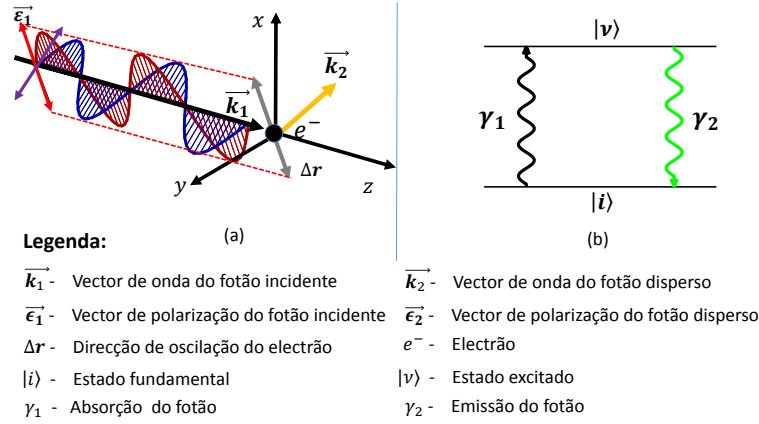


Figura 1.1: Processo de dispersão: **(a)** Na origem do eixo cartesiano (xyz) encontra-se o electrão responsável pela dispersão do fóton incidente γ_1 . O fóton incidente γ_1 é caracterizado por: um vector de onda \vec{k}_1 com o mesmo sentido do eixo (z), uma polarização linear \vec{e}_1 com um ângulo (de polarização) χ_1 no plano (xy). **(b)** O electrão é forçado a oscilar na mesma direcção de oscilação do campo eléctrico do fóton incidente γ_1 . Como a energia do fóton incidente é ressonante com a energia de transição para o estado excitado $|v\rangle$, o electrão transita para este último estado indicado. Posteriormente o electrão retorna para o estado fundamental $|i\rangle$ com emissão de um fóton γ_2 .

O processo de dispersão anteriormente ilustrado pode ser expresso pela seguinte equação

$$\gamma_1 + X \rightarrow X^* \rightarrow \gamma_2 + X, \quad (1.1)$$

onde γ_1 é o fóton incidente, γ_2 é o fóton emitido, X é o ião no seu estado fundamental e X^* é o ião no seu estado excitado. Como o processo de dispersão é elástico a energia do estado inicial (E_i) e do estado final (E_f) são iguais

$$E_f = E_i. \quad (1.2)$$

No contexto da presente dissertação, o estado fundamental corresponde ao estado da estrutura hiperfina dado por

$$|i\rangle = 2s_{1/2}^{F=F_i} = |f\rangle = 2s_{1/2}^{F=F_f}, \quad (1.3)$$

enquanto que o estado excitado $|v\rangle$ corresponde ao estado da estrutura hiperfina dado por

$$|v\rangle = 2p_{3/2}^{F=F_v}. \quad (1.4)$$

No sistema de coordenadas consistente com a Figura 1.2 a distribuição angular do processo de dispersão em coordenadas espaciais esféricas fica totalmente descrita pela parametrização dada na Tabela 1.1.

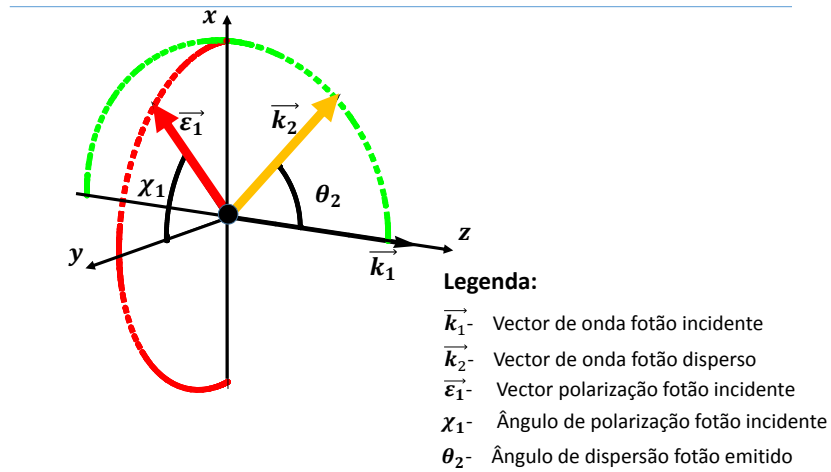


Figura 1.2: Geometria de dispersão: Para simplificação do desenvolvimento analítico da secção eficaz diferencial assume-se que o fóton emitido é disperso com ângulo θ_2 segundo o plano (xz), sendo este fóton caracterizado por um vector de onda \vec{k}_2 . Pressupõe-se que o detector é insensível ao ângulo de polarização do fóton emitido, por este motivo a polarização do fóton emitido é considerada aleatória. A polarização do fóton incidente e do fóton emitido é considerada linear. Por fim, tem-se que o vector de polarização ($\vec{\epsilon}$) e o vector de onda (\vec{k}) são perpendiculares $\vec{\epsilon} \cdot \vec{k} = 0$.

Tabela 1.1: Parametrização da geometria de dispersão.

	Fóton incidente	Fóton emitido
Ângulo dispersão	-	θ_2
Ângulo polarização	χ_1	χ_2
Vector de onda	$(0, 0, 1)$	$(\sin \theta_2, 0, \cos \theta_2)$
Vector de polarização	$(\sin \chi_1, \cos \chi_1, 0)$	$(\sin \chi_2 \cos \theta_2, \cos \chi_2, -\sin \chi_2 \sin \theta_2)$

1.4 Contexto experimental

Com o objectivo de contextualizar o estudo computacional realizado neste trabalho num cenário experimental real, apresenta-se o esquema de montagem experimental associado ao acelerador de iões pesados SIS-300, pertencente ao *Facility for Antiproton and Ion Research* (FAIR) [26]. Este sincrotrão situado em Darmstadt, Alemanha, é composto por um anel com uma circunferência de 1100 m e um campo magnético de 6 T [26]. No esquema de montagem experimental proposto para este acelerador de iões pesados as energias de transição $2p_{3/2}^{F=F_v} \rightarrow 2s_{1/2}^{F=F_f}$ são obtidas através de dois feixes *laser* de excitação que se propagam segundo a direcção do eixo (z). Estes dois feixes *laser* colidem com um terceiro feixe de iões pesados que é produzido no sincrotrão SIS-300. Embora cada *laser* seja caracterizado por uma frequência de ressonância específica, o mesmo estado excitado ($2p_{3/2}^{F=F_v}$) pode decair para ambos os níveis da estrutura hiperfina do estado fundamental. Através das diferenças entre as energias de ressonância da secção eficaz diferencial das transições em estudo consegue-se obter a energia de separação da estrutura hiperfina dos níveis $2s_{1/2}$ e $2p_{3/2}$. Este esquema experimental encontra-se na Figura 1.3.

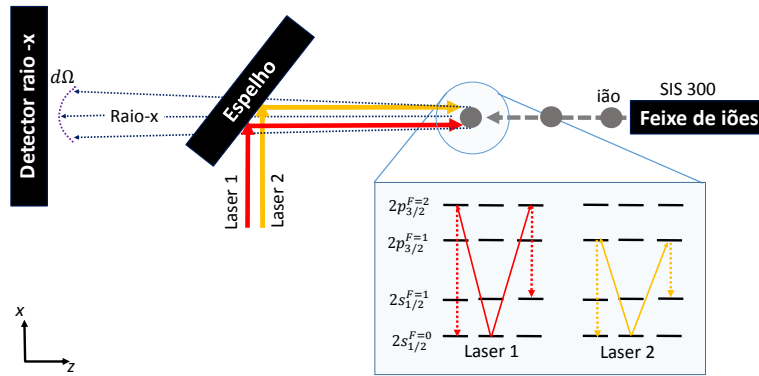


Figura 1.3: Esquema de montagem experimental proposto pelo FAIR para obtenção das energias de transição $2p_{3/2}^{F=F_v} \rightarrow 2s_{1/2}^{F=F_f}$ em iões altamente carregados do tipo lítio: dois feixes *laser* de excitação propagam-se segundo a direcção do eixo (z). Os dois feixes *laser* colidem com um feixe de iões previamente produzido no sincrotrão SIS-300. Cada *laser* é caracterizado por uma frequência de ressonância específica, no entanto, o mesmo estado excitado ($2p_{3/2}^{F=F_v}$) pode decair para ambos os níveis da estrutura hiperfina do estado fundamental. A radiação de raio-x que resulta do decaimento é emitida maioritariamente na direcção de propagação dos feixes *laser*. Adaptado da referência [26].

1.4.1 Efeito Doppler relativístico

A radiação de excitação *laser* ω_L no referencial do laboratório encontra-se na gama de energia da luz visível. No entanto, devido ao efeito de Doppler relativista a energia de interacção entre o fóton e o ião no centro de massa do sistema (fóton + ião) é da ordem de grandeza da radiação-X. A relação entre a energia do fóton no referencial de laboratório ($\hbar\omega_L$) e a energia no referencial do centro de massa do sistema ($\hbar\omega_0$) é dada por [26].

$$\hbar\omega_0 = \sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}} \hbar\omega_L, \quad (1.5)$$

onde β representa a razão entre a velocidade da luz (c) no vácuo e ($v_{i\tilde{a}o}$) a velocidade do feixe de iões

$$\beta = \frac{v_{i\tilde{a}o}}{c} . \quad (1.6)$$

Para a geometria do SIS-300, tem-se como um possível valor de referência ($\beta = 0.99924152$) [26]. Assim, para uma energia de excitação no referencial de laboratório $\hbar\omega_L = 5.465$ (eV) a energia de excitação no centro de massa do sistema é $\hbar\omega_o = 280.6$ (eV) e a energia medida no detector no centro de massa de laboratório associada ao decaimento do electrão é $\hbar\omega_X = 14.41$ (keV). A radiação emitida encontra-se assim na gama de energia da radiação-X. Esta radiação é detectada por um detector constituído por um monocromador de cristal único em energia dispersiva de silício, que permite seleccionar uma faixa específica de energia a ser analisada.

1.4.2 Casos de estudo

Não existe uma definição clara do estado de carga a partir do qual um ião é considerado altamente carregado. No entanto, os iões do tipo lítio com número atómico superior a 60 são considerados de forma consensual iões altamente carregados na literatura, sendo estes os iões em estudo neste trabalho. Estes iões estão identificados na Tabela 1.2, onde também se apresenta o número atómico (Z), o momento angular nuclear total (I), a razão entre a largura a meia altura (Γ) da transição $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ e a constante hiperfina dipolar magnética (A_{EHF}) do nível $2p_{3/2}$, e as referências onde se obtiveram os parâmetros necessários para o cálculo da energia de separação da estrutura hiper fina.

Tabela 1.2: Casos de estudo.

Ião	Z	I	Γ/A_{EHF}	Artigos de Referência
$^{151}\text{Eu}^{60+}$	63	5/2	0.38	[24, 35]
$^{165}\text{Ho}^{64+}$	67	7/2	0.48	[24, 35]
$^{175}\text{Lu}^{68+}$	71	7/2	1.8	[24, 35]
$^{181}\text{Ta}^{70+}$	73	7/2	1.3	[24, 35]
$^{185}\text{Re}^{72+}$	75	5/2	1.3	[24, 35]
$^{209}\text{Bi}^{80+}$	83	9/2	4.1	[24, 35]

A escolha destes iões foi motivada em primeiro lugar pelo facto de que os iões seleccionados serem considerados isótopos estáveis. Adicionalmente, para estes iões a constante hiperfina dipolar magnética (A_{EHF}) do nível $2p_{3/2}$ está bem caracterizada na literatura disponível, permitindo assim o cálculo da energia de separação da estrutura hiperfina. Por fim, verifica-se que para estes iões a energia de separação da estrutura hiperfina do nível $2p_{3/2}$ é da mesma ordem de grandeza da largura do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. Espera-se por este motivo que os efeitos de interferência quântica sejam mensuráveis nos iões identificados na Tabela 1.2.

Por outro lado, uma condição necessária para que o processo de dispersão anteriormente descrito seja considerado elástico, é que a energia de repouso do electrão seja superior a energia de recuo do electrão [36]. Para o urânio e considerando o método experimental proposto pelo FAIR a energia de

excitação *laser* é aproximadamente $\hbar\omega_L = 5.5$ (eV), sendo esta energia inferior energia de repouso do electrão que é dada por

$$\text{Energia repouso electrão} = mc^2 \approx 0.511 \text{ MeV} . \quad (1.7)$$

Como os iões identificados na Tabela 1.2 têm todos um número atómico inferior ao número atómico do urânio ($Z = 92$), pode-se concluir que para os iões em estudo a energia de recuo é inferior a energia de repouso de electrão. Este facto viabiliza o pressuposto de elasticidade do processo de dispersão em estudo.

Fundamentação teórica 2

No presente capítulo faz-se uma descrição dos principais conceitos teóricos associados ao modelo físico que se utilizou para estudar os efeitos de interferência quântica nos espectros da secção eficaz diferencial da transição em estudo.

2.1 Momento angular

A análise dos efeitos de interferência quântica em estudo no âmbito deste trabalho tem uma forte componente de teoria quântica do momento angular. Por este motivo, nesta secção abordam-se alguns aspectos fundamentais à compreensão da relação entre o momento angular e a descrição de estados quânticos.

2.1.1 Operador momento angular

Define-se em primeiro lugar o operador momento angular \hat{L} , que é expresso por

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}, \quad (2.1)$$

onde \hat{r} representa operador posição e \hat{p} é o operador do momento linear. A projecção do operador do momento angular orbital \hat{L} sobre os eixos x , y e z é expressa pelas componentes \hat{L}_x , \hat{L}_y e \hat{L}_z respectivamente. Através de uma transformação de coordenadas dada por

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (2.2)$$

obtêm-se as componentes de \hat{L}_x , \hat{L}_y e \hat{L}_z em coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

2.1.2 Harmónicos esféricos

O conjunto dos valores próprios comuns a \hat{L}^2 e \hat{L}_z são definidos em termos dos harmónicos esféricos por $Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi)$, sendo estes expressos por [37, p.5]

$$Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell, m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\phi). \quad (2.3)$$

A expressão (2.3) mostra que os harmónicos esféricos podem ser descritos como um produto de

funções do ângulo polar (θ) e do ângulo azimutal (ϕ). As letras m_ℓ e ℓ representam o número quântico magnético e o número quântico orbital respectivamente, e são os valores próprios de \hat{L}^2 e \hat{L}_z . Utilizando unidades atômicas ($\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |\Psi\rangle &= \ell(\ell + 1) |\Psi\rangle \quad \text{com: } \ell = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{L}_z |\Psi\rangle &= m_\ell |\Psi\rangle \quad \text{com: } m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell.\end{aligned}\tag{2.4}$$

A componente angular azimutal $\Phi_{m_\ell}(\phi)$ é dada pela seguinte expressão [37, p.5]

$$\Phi_{m_\ell}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_\ell\phi}.\tag{2.5}$$

Por sua vez, a componente angular polar $\Theta_{\ell, m_\ell}(\theta)$ é dada em função dos polinómios associados de Legendre $P_\ell^{m_\ell}(x)$ [37, p.6]

$$\Theta_{\ell, m_\ell}(\theta) = (-1)^{m_\ell} \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(\ell - m_\ell)}{4\pi(\ell + m_\ell)}} P_\ell^{m_\ell}(\cos\theta) e^{i\phi}.\tag{2.6}$$

A relação entre os polinómios associados de Legendre $P_\ell^{m_\ell}(x)$ e os polinómios de Legendre $P_n(x)$ é expressa da seguinte forma

$$P_\ell^{m_\ell}(x) \equiv (1 - x^2)^{\frac{m_\ell}{2}} \frac{d^{m_\ell} P_n(x)}{dx^{m_\ell}}.\tag{2.7}$$

Os polinómios associados de Legendre $P_\ell^{m_\ell}(x)$ garantem a ortogonalidade do produto interno dos diferentes harmónicos esféricos em ℓ e m_ℓ . Sendo esta condição geral de ortogonalidade dada explicitamente em termos dos harmónicos esféricos por

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\phi Y_{\ell_i, m_i}^*(\theta, \phi) Y_{\ell_j, m_j}(\theta, \phi) = \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{m_i m_j}.\tag{2.8}$$

A ortogonalidade dos harmónicos esféricos é importante no contexto do cálculo realizado no presente trabalho porque permite que um vector harmónico esférico geral seja expresso por uma base de vectores harmónicos esféricos ortogonais.

Paridade

A paridade de um estado quântico com momento angular total ($\vec{\ell}$) reflecte a simetria espacial da função de onda após uma inversão do eixo de coordenadas dada por

$$(r, \theta, \phi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \phi + \pi).\tag{2.9}$$

Define-se assim a paridade dos harmónicos esféricos por

$$Y_{\ell, m_\ell}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^\ell Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi).\tag{2.10}$$

Esta propriedade física do sistema quântico é expressa pelo operador de paridade $\hat{\Pi}$ e tem dois resultados possíveis:

$$\hat{\Pi} |\Psi\rangle = \pi |\Psi\rangle, \quad \pi = (-1)^\ell = \pm 1.\tag{2.11}$$

Spin

O electrão tem um momento angular intrínseco que se designa por spin (\vec{s}), sendo o seu operador representado por \hat{S} . Os valores próprios de \hat{S}^2 e \hat{S}_z são [37, p.7]

$$\hat{S}^2 \chi_\mu = \frac{3}{4} \chi_\mu, \quad \hat{S}_z \chi_\mu = \mu \chi_\mu, \quad (2.12)$$

na expressão anterior, o termo χ_μ denomina-se por spinor e é expresso por

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{para } \mu = \pm 1/2. \quad (2.13)$$

2.1.3 Adição de momentos angulares

Da soma vectorial de dois momentos angulares genéricos \vec{j}_1 e \vec{j}_2 resulta um momento angular total \vec{j}_3

$$\vec{j}_3 = \vec{j}_1 + \vec{j}_2. \quad (2.14)$$

Os valores próprios de \hat{j}_3^2 e \hat{j}_{3z} são

$$\begin{aligned} \hat{j}_3^2 |\Psi\rangle &= j_3(j_3 + 1) |\Psi\rangle \quad \text{com: } j_3 = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{j}_{3z} |\Psi\rangle &= m_{j_3} |\Psi\rangle \quad \text{com: } m_{j_3} = -j_3, -j_3 + 1, \dots, j_3 - 1, j_3, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde j_3 e m_{j_3} representam respectivamente o número quântico orbital e o número quântico magnético total, que resultam do acoplamento de \vec{j}_1 com \vec{j}_2 . Desta forma, um estado caracterizado por um momento angular total \vec{j}_3 é expresso em função dos valores próprios m_{j_1} , m_{j_2} , j_1 e j_2 , por

$$|j_3 \ m_{j_3}; j_1 \ j_2\rangle = \sum_{m_{j_1}=-j_1}^{j_1} \sum_{m_{j_2}=-j_2}^{j_2} \langle j_1 \ m_{j_1}; j_2 \ m_{j_2} | j_3 \ m_{j_3}; j_1 \ j_2 \rangle |j_1 \ m_{j_1}; j_2 \ m_{j_2}\rangle, \quad (2.16)$$

onde o termo

$$\langle j_1 \ m_{j_1}; j_2 \ m_{j_2} | j_3 \ m_{j_3}; j_1 \ j_2 \rangle, \quad (2.17)$$

corresponde à notação dos coeficientes de Clebsch-Gordan. Estes coeficientes são geralmente expressos através dos coeficientes de Wigner, também conhecidos com símbolos $3j$. No caso específico de um momento angular j_3 que resulta do acoplamento do momento angular de j_1 com j_2 , os coeficientes $3j$ são dados por [37, p.15]

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_{j_1} & m_{j_2} & m_{j_3} \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_{j_3}}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1 \ m_{j_1}; j_2 \ m_{j_2} | j_3 \ (-m_{j_3}); j_1 \ j_2 \rangle. \quad (2.18)$$

O valor do coeficiente $3j$ dado pela expressão (2.18) é não nulo apenas caso se verifiquem as seguintes condições

$$\begin{aligned} |j_1 - j_2| &\leq j_3 \leq |j_1 + j_2|, \\ m_{j_3} &= m_{j_1} + m_{j_2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Estrutura fina e hiperfina

Da adição do spin \vec{s} do electrão com o momento angular total $\vec{\ell}$ resulta a estrutura fina que é caracterizada por um momento angular total \vec{j} , desta forma, a degenerescência em ℓ é quebrada parcialmente. Assim, um estado quântico caracterizado por um momento angular ℓ , separa-se em dois estados caracterizados por um momento angular total $j = \ell \pm 1/2$. A ordem de grandeza da energia da estrutura fina é caracterizada por ($\alpha \approx 1/137$), sendo (α) usualmente designada por constante da estrutura fina.

De forma análoga, da adição do momento angular nuclear \vec{I} com o momento angular total de um sistema de electrões \vec{j} , resulta um momento angular total associado ao sistema de partículas (electrões + protões + neutrões) da estrutura hiperfina \vec{F} , que quebra degenerescência em j . Devido à ordem de grandeza da energia de separação da estrutura hiperfina, a medição da energia de separação da EHF está geralmente associada a experiências de alta resolução [4, 23, 38, 39].

A soma vectorial relativa ao momento angular total da estrutura fina (EF) e a soma vectorial relativa ao momento angular total da estrutura hiperfina (EHF) anteriormente descritas encontra-se ilustrada na Figura 2.1

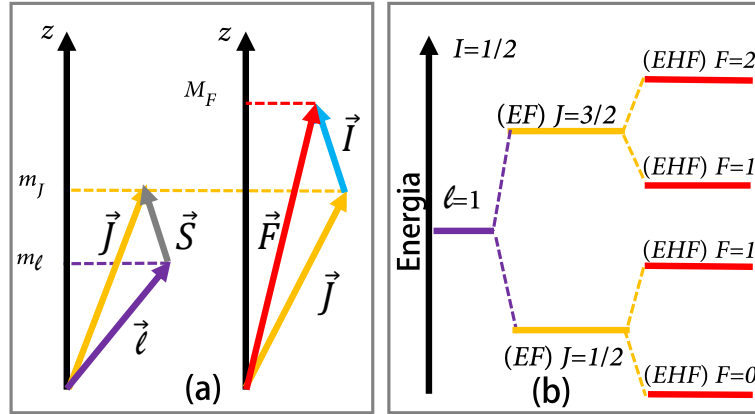


Figura 2.1: (a) Soma vectorial relativa ao momento angular total da estrutura fina (EF). Soma vectorial relativa ao momento angular total da estrutura hiperfina (EHF). (b) Distribuição dos níveis de energia da estrutura fina e hiperfina.

2.2 Secção eficaz diferencial

Nesta secção são apresentados os principais fundamentos teóricos relativos à interacção do fóton com o ião, enunciando-se as equações que a partir das quais se deriva a expressão da secção eficaz diferencial da transição $2p_{3/2}^{F=F_i} \rightarrow 2s_{1/2}^{F=F_v}$ que por simplicidade será doravante apenas designada como secção eficaz diferencial.

2.2.1 Interacção entre a radiação e a matéria

Como anteriormente indicado, o objecto de estudo desta tese de dissertação são os efeitos de interferência quântica em iões altamente carregados da sequência isoelectrónica do lítio. Por este motivo

todos os iões em estudo têm uma estrutura electrónica do tipo

$$1s^2 2s^1, \quad (2.20)$$

ou seja, cada ião tem três electrões, dois electrões preenchem completamente a camada 1s. O terceiro electrão desemparelhado da camada 2s é o electrão envolvido em todo o processo de dispersão em estudo neste trabalho. Uma vez que os electrões da camada 1s estão emparelhados, o estudo dos iões do tipo lítio pode ser aproximado ao estudo de iões do tipo hidrogénio. Define-se assim o hamiltoniano não perturbado do ião por

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = \frac{\hat{p}^2(\mathbf{r})}{2m_e} + \hat{V}(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

onde $\hat{V}(\mathbf{r})$ é operador do potencial nuclear (assume-se que já inclui o efeito e blindagem dos electrões da camada 1s), \hat{p} é o operador do momento linear do electrão desemparelhado, \mathbf{r} é o versor do vector de posição e m_e é a massa do electrão. Se ao hamiltoniano não perturbado \hat{H}_0 , adicionar-se uma perturbação \hat{H}_I periódica no tempo, com uma frequência de oscilação ω que está associada à interacção do átomo com a radiação electromagnética, de modo que

$$\hat{H}_I(t) \propto \cos \omega t. \quad (2.22)$$

Obtém-se o hamiltoniano total expresso por

$$\hat{H}_T(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \hat{H}_I(\mathbf{r}, t). \quad (2.23)$$

O hamiltoniano de interacção dado pela expressão (2.22), é muitas vezes expresso em termos do potencial vector $\vec{A}(\mathbf{r}, t)$, que descreve interacção do átomo com a radiação electromagnética [37, p.148]

$$\hat{H}_I(\mathbf{r}, t) = -ec\vec{\alpha} \cdot \vec{A}(\mathbf{r}, t), \quad (2.24)$$

onde $\vec{\alpha}$ é a matriz de Dirac, (e) é a carga do electrão e $\vec{A}(\mathbf{r}, t)$ é dado em termos da quantização do campo electromagnético num determinado volume (V) por [37, p.146]

$$\vec{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V}} \left[\hat{m}_i \epsilon_{\lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t} + \hat{n}_i \epsilon_{\lambda}^{\dagger} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega t} \right]. \quad (2.25)$$

Na expressão (2.25) \hat{m}_i é o operador de aniquilação, \hat{n}_i é o operador de criação, ϵ_0 é a permissividade do vácuo, \hbar é a constante de Planck reduzida e \vec{k} é o vector de onda da radiação electromagnética. A relação entre o vector de onda e a frequência de oscilação da radiação electromagnética é dada por

$$|k| = \frac{\omega}{c}. \quad (2.26)$$

2.2.2 Operador de dispersão

O processo de dispersão a dois fotões permite parametrizar diferentes processos físicos, como por exemplo a absorção a dois fotões, a emissão a dois fotões ou a dispersão de Raman, sendo que cada um destes processos é representado pelo diagrama de Feynman respectivo [40].

O diagrama de Feynman que corresponde ao processo de absorção do fóton ($\gamma = 1$) e emissão do fóton ($\gamma = 2$) encontra-se ilustrado na Figura 2.2.

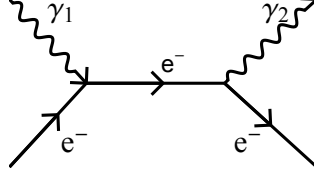


Figura 2.2: Diagrama de Feynman relativo ao processo de absorção do fóton ($\gamma = 1$) e emissão do fóton ($\gamma = 2$) .

A evolução temporal de um sistema quântico representado pela função de onda Ψ que se encontra num determinado tempo t_0 num estado Ψ_i e que evolui passado um instante t para o estado Ψ_f é dada pelo operador de dispersão de ordem n (\hat{S}^n). Este operador é expresso em função do hamiltoniano de interacção por [37, p.150]

$$\hat{S}^n = \frac{(-i)^n}{\hbar^n} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \hat{H}_I(t_1) \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \hat{H}_I(t_2) \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_I(t_n) . \quad (2.27)$$

Por sua vez, para o caso particular de um processo de dispersão com um fóton incidente e um fóton disperso, e partindo do operador de dispersão da equação (2.27) restrita à segunda ordem, visto tratar-se um processo de dispersão a dois fótons [19]. Mostra-se que a amplitude de transição (\mathcal{M}) é expressa por [41]

$$\mathcal{M}_{i \rightarrow f}^{\vec{k}_1 \epsilon_1, \vec{k}_2 \epsilon_2} = \sum_v \left[\frac{\langle f | \vec{\alpha} \epsilon_2 e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} | v \rangle \langle v | \vec{\alpha} \epsilon_1 e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} | i \rangle}{\omega_{vi} - \omega_L - i\Gamma_v/2} \right] . \quad (2.28)$$

A expressão (2.28) descreve matematicamente todo o processo físico de dispersão anteriormente descrito, onde o fóton incidente e o fóton emitido são caracterizados por um vector de onda (\vec{k}_i) e uma polarização (ϵ_i). A variável ω_{vi} corresponde a frequência de ressonância da transição do estado inicial $|i\rangle$ para o estado excitado $|v\rangle$ e da mesma forma se define ω_{fv} como a frequência de ressonância da transição do estado excitado $|v\rangle$ para o estado final $|f\rangle$. Γ_v é largura da transição e ω_L é a frequência do *laser* de excitação. Assim, a probabilidade do fóton incidente γ_1 com frequência (ω) ser disperso segundo um ângulo θ_2 em relação à direcção de propagação do vector de onda do fóton incidente (\vec{k}_1) é expressa através da amplitude de transição por

$$P_{f \rightarrow i} \propto |\langle f | \mathcal{M}_{i \rightarrow f} | i \rangle|^2 . \quad (2.29)$$

Experimentalmente esta probabilidade de transição do electrão é expressa através da secção eficaz diferencial, que é dada em função da amplitude de transição por [2]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega_L, \theta_2, \chi_1) = \frac{1}{(2F_i + 1)} \sum_{m_i, F_f, m_f, J_f} \sum_{\epsilon_2} \left| \mathcal{M}_{i \rightarrow f}^{\vec{k}_1 \epsilon_1, \vec{k}_2 \epsilon_2} \right|^2 , \quad (2.30)$$

onde Ω é o ângulo sólido. A secção eficaz diferencial é expressa em unidades do sistema internacional por (m^2/sr). No entanto, no presente trabalho a secção eficaz diferencial será expressa em unidades de área arbitrárias (u.a).

2.2.3 Estados ressonantes e não-ressonantes

Antes de se iniciar a descrição do cálculo dos elementos de matriz relativos à secção eficaz diferencial dada pela expressão (2.30), é pertinente introduzir o conceito de estado ressonante e não-ressonante. Assim, quando se escolhe uma energia do *laser* próxima da energia de excitação de um estado intermédio opta-se por chamar a esse estado ressonante (ν) e os outros estados de não-ressonantes ($n\nu$). Esta nomenclatura deve-se ao facto da energia do estado ressonante ser a mais próxima da energia do *laser* de excitação. Os efeitos de interferência quântica em estudo neste trabalho devem-se as sobreposições entre os decaimentos dos estados ressonantes e não-ressonantes.

Termos de interferências quântica

A Figura 2.3 apresenta um esquema ilustrativo do processo de interferência quântica em estudo nesta dissertação. Nesta figura um electrão que se encontra no estado fundamental $|0\rangle$ absorve uma energia de excitação próxima da energia de ressonância do estado intermédio $|2\rangle$. Assim, embora a probabilidade do electrão transitar para o estado $|2\rangle$ através de uma transição considerada ressonante seja muito maior que a probabilidade do electrão transitar para os estados $|3\rangle$ ou $|1\rangle$ por intermédio de uma transição considerada não-ressonante, estas transições não-ressonantes para os estados $|3\rangle$ e $|1\rangle$ podem também ocorrer. Da sobreposição entre os decaimentos dos estados ressonantes e os estados não-ressonantes surgem os efeitos de interferências quântica, nomeadamente, a assimetria das linhas espectrais e o desvio das energias de ressonância no espectro da secção eficaz diferencial.

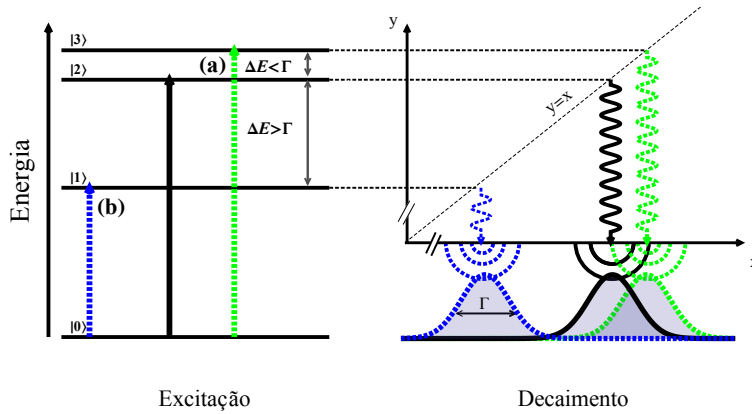


Figura 2.3: Esquema ilustrativo do processo de interferência quântica: Um electrão inicialmente no estado fundamental $|0\rangle$ absorve uma energia de excitação próxima da energia de ressonância do estado intermédio $|2\rangle$. Nesta situação existe uma maior probabilidade do electrão transitar para o estado $|2\rangle$ através de uma transição considerada ressonante (traço contínuo), no entanto, existe também a probabilidade do electrão transitar para os estados $|3\rangle$ e $|1\rangle$ por meio de uma transição considerada não-ressonante (tracejado). Como no caso (a), a energia de separação entre os estados $|2\rangle$ e $|3\rangle$ é menor do que a largura a meia altura do decaimento ($|2\rangle \rightarrow |0\rangle$), observa-se uma sobreposição entre estes dois estados que pode causar à assimetria das linhas espectrais e o desvio das energias de ressonância no espectro da secção eficaz diferencial. Em oposição, no caso (b) a energia de separação entre os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ é maior que a largura a meia altura do decaimento ($|2\rangle \rightarrow |0\rangle$), por este motivo, espera-se um efeito muito menor de interferência quântica entre estes dois estados.

2.2.4 Expansão multipolar

Por forma a obter-se a equação da secção eficaz diferencial, realiza-se em seguida a descrição do cálculo dos elementos de matriz relativos à expressão (2.28). Este cálculo pode ser simplificado através de uma expansão multipolar onde o fóton incidente ($\gamma = 1$) e fóton emitido ($\gamma = 2$) são expressos por

$$\epsilon_\gamma e^{i\vec{k}_\gamma \cdot \vec{r}} = \sum_{L_\gamma M_\gamma \lambda_\gamma} \left[\epsilon_\gamma \cdot \vec{Y}_{L_\gamma M_\gamma}^{(\lambda_\gamma)}(\vec{k}_\gamma) \right] \left[\vec{a}_{L_\gamma M_\gamma}^{(\lambda_\gamma)} \right], \quad (2.31)$$

onde L é a ordem da expansão multipolar, λ identifica o tipo de multipolo. O valor $\lambda = 0$ indica um multipolo magnético e $\lambda = 1$ indica um multipolo eléctrico. Os termos da expansão multipolar com ($L = 1$) designam-se dipolares e os termos da expansão multipolar com ($L = 2$) designam-se quadripolares.

Transições multipolares

Do cálculo dos elementos de matriz relativos à expressão (2.28) resultam as regras de selecção que reflectem a conservação da paridade e do momento angular para cada tipo de transição. E a cada tipo de transição corresponde um determinado tipo de multipolo da expressão (2.31). As transições associadas aos multipolos de primeira ordem designam-se dipolares e as transições associadas aos multipolos de segunda ordem designam-se por quadripolares. Do mesmo modo, as transições associadas aos multipolos eléctricos designam-se por transições eléctricas e as transições associadas aos multipolos magnéticos designam-se por transições magnéticas. Assim, uma transição dipolar eléctrica corresponde ao termo ($L = 1$) do multipolo eléctrico ($\lambda = 1$) da expansão dada por (2.31). A probabilidade de cada tipo de transição diminui com a ordem do multipolo associado. Nomeadamente, o termo eléctrico de primeira ordem é superior à soma dos restantes termos da expansão dada por (2.31). Por este motivo, as transições dipolares eléctricas são mais prováveis que as restantes transições multipolares. É assim usual designar-se as transições dipolares eléctricas como transições permitidas e as restantes como transições proibidas. Desta forma, as regras de selecção apresentam um papel fundamental em espectroscopia, uma vez que expressam o tipo de transição radiactiva mais provável entre dois estados quânticos $|\Psi_i\rangle$ e $|\Psi_f\rangle$ tendo em conta a paridade, o momento angular total de cada um desses estados e o tipo de multipolo associado a transição. Os tipos de transições multipolares em estudo neste trabalho, tendo presente as regras de selecção e a ordem multiploar máxima do cálculo realizado são apresentadas na Figura (2.4)

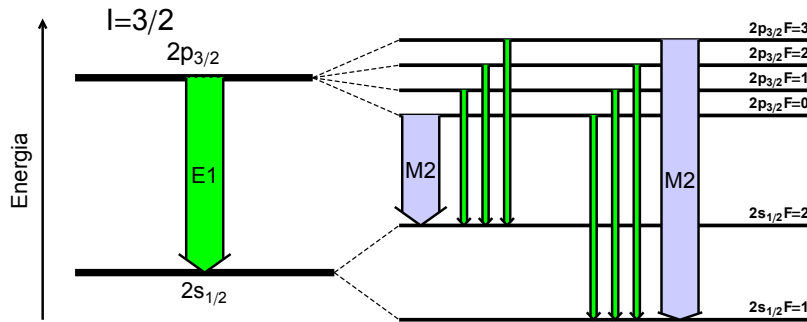


Figura 2.4: Transições multipolares em estudo

O cálculo computacional implementado neste estudo deriva de uma expansão multipolar que inclui os multipolos eléctricos e magnéticos de primeira e segunda ordem que define as transições

permitidas, tendo presente as regras de selecção. Transições permitidas identificadas a verde contêm como multipolo principal E1 (dipolar eléctrico) e as transições a azul têm M2 (quadripolar magnético) como multipolo principal.

Componente angular da expansão multipolar

A equação (2.31) pode ser decomposta em duas componentes, uma componente angular que é expressa pelos termos $\vec{Y}_{LM}^{(\lambda)}$ e uma segunda componente radial que é expressa pelos vectores potenciais multipolares $\vec{a}_{LM}^{(\lambda)}$. A relação entre os vectores harmónicos esféricos \vec{Y}_{LLM} e a quantidade Y_{LM}^λ da expansão dada pela expressão (2.31) é discutida na referência [42], onde se mostra que

$$\vec{Y}_{LM}^{(0)}(\mathbf{k}) = \vec{Y}_{LLM}(\mathbf{k}) , \quad (2.32)$$

$$\vec{Y}_{LM}^{(1)}(\vec{k}) = -i\mathbf{k} \times \vec{Y}_{LM}^{(0)}(\mathbf{k}) , \quad (2.33)$$

$$\vec{Y}_{LM}^{(-1)}(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot Y_{LM}^{(0)}(\mathbf{k}) . \quad (2.34)$$

Como \mathbf{k} e ϵ são perpendiculares, para o caso particular em que $\lambda = -1$, verifica-se que o produto interno $\mathbf{k} \cdot \epsilon$ relativo à expressão (2.31) é nulo. Portanto a expansão multipolar é dada apenas pelos termos eléctricos ($\lambda = 1$) e magnéticos ($\lambda = 0$). Por sua vez, a relação entre os vectores harmónicos esféricos \vec{Y}_{LLM} e os harmónicos esféricos $Y_{\ell,m}$ é demonstrada na referência [37, p.23].

Componente radial da expansão multipolar

Os vectores potenciais multipolares $\vec{a}_{LM}^{(\lambda)}$ presentes na equação (2.31) são dados por [42]

$$\vec{a}_{LM}^{(0)} = g_L(kr) \vec{Y}_{L,L,M}(\mathbf{r}) , \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \vec{a}_{LM}^{(1)} = & \left(\frac{L}{2L+1} \right)^{1/2} g_{L+1}(kr) \vec{Y}_{L,L+1,M}(\mathbf{r}) \\ & + \left(\frac{L+1}{2L+1} \right)^{1/2} g_{L-1}(kr) \vec{Y}_{L,L-1,M}(\mathbf{r}) , \end{aligned}$$

$$g_L(kr) = 4\pi i^L j_L(kr) . \quad (2.36)$$

onde j_L é a função de Bessel de ordem L .

2.2.5 Cálculo dos elementos de matriz relativos à amplitude de transição

Prossegue-se agora com o cálculo dos elementos de matriz relativos à amplitude de transição. Substituindo na equação (2.28) o fóton incidente e o fóton emitido pela expansão multipolar respectiva,

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{i \rightarrow f} &= \sum_{\nu} \left[\frac{\langle f | \vec{\epsilon}_2 e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} | \nu \rangle \langle \nu | \vec{\epsilon}_1 e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} | i \rangle}{\omega_{\nu i} - \omega_L - i\Gamma_{\nu}/2} \right] \\
&= \sum_{\nu} \sum_{\substack{L_2 L_1 \\ M_2 M_1 \\ \lambda_1 \lambda_2}} \left[\frac{\langle f | \left[\vec{\epsilon}_2 \cdot \vec{Y}_{L_2 M_2}(\vec{k}_2) \right] \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{a}_{L_2 M_2}^{(\lambda_2) \dagger} \right] | \nu \rangle \langle \nu | \left[\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{Y}_{L_1 M_1}(\vec{k}_1) \right] \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{a}_{L_1 M_1}^{(\lambda_1)} \right] | i \rangle}{\omega_{\nu i} - \omega_L - i\Gamma_{\nu}/2} \right] \\
&= \sum_{\nu} \sum_{\substack{L_2 L_1 \\ M_2 M_1 \\ \lambda_1 \lambda_2}} \left[\frac{\langle f | \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{a}_{L_2 M_2}^{(\lambda_2) \dagger} \right] | \nu \rangle \langle \nu | \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{a}_{L_1 M_1}^{(\lambda_1)} \right] | i \rangle}{\omega_{\nu i} - \omega_L - i\Gamma_{\nu}/2} \right] \Theta_{L_1 L_2}^{\lambda_1, \lambda_2}, \quad (2.37)
\end{aligned}$$

com

$$\Theta_{L_1 L_2}^{\lambda_1 \lambda_2} = \vec{\epsilon}_2 \cdot \vec{Y}_{L_2 M_2}^{(\lambda_2)}(\vec{k}_2) \vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{Y}_{L_1 M_1}^{\dagger(\lambda_1)}(\vec{k}_1), \quad (2.38)$$

que representa o somatório dos harmónicos esféricos relativos à expansão multipolar do fóton incidente e do fóton emitido. Na equação (2.37) o somatório sobre (ν) corresponde ao somatório sobre todos os estados ressonantes. O segundo somatório da equação (2.37) corresponde às diferentes combinações multipolares (L_i, λ_i) entre o fóton incidente e o fóton emitido, M_1 e M_2 correspondem a projecção de L_1 e L_2 sobre o eixo de coordenadas (z) .

Pelo teorema de Wigner-Eckart [37, p.17]

$$\langle J_i, m_i | t_L^{(\lambda)} | J_v, m_v \rangle = (-1)^{J_i - m_i} \begin{pmatrix} J_i & \lambda & J_v \\ -m_i & L & m_v \end{pmatrix} \langle J_i || t^{(\lambda)} || J_v \rangle, \quad (2.39)$$

onde $\langle J_i || t^{(\lambda)} || J_v \rangle$ são os elementos de matriz reduzidos que são independentes dos números quânticos m_i, m_v e da ordem multipolar L [37, p.17].

Através do teorema de Wigner-Eckart e com a resolução dos elementos de matriz reduzidos mostra-se que [42]

$$\begin{aligned}
\langle f | \vec{\alpha} \cdot \vec{a}_{LM}^{(\lambda) \dagger} | i \rangle &= (-1)^{F_f + I + F_i + 2J_f + \lambda - m_f - 1/2} \sqrt{\frac{4\pi [F_f, F_i, J_f, J_i]}{[L]}} \times \\
&\quad \begin{pmatrix} F_f & L & F_i \\ -m_f & M & m_i \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J_i & I & F_i \\ F_f & L & J_f \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} J_f & L & J_i \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \bar{M}_{fi}^{\lambda L}. \quad (2.40)
\end{aligned}$$

A notação $[x]$ representa o cálculo dado por

$$[x] = 2x + 1. \quad (2.41)$$

Assim, substituindo os elementos de matriz obtidos na equação (2.40) na equação da amplitude de transição (2.37) e após manipulações algébricas obtém-se

$$\mathcal{M}_{i \rightarrow f} = \sum_{F_v} \sum_{J_v} \left[\left(\frac{[\Omega_{J_i J_v J_f}^{F_i F_v F_f}]}{\omega_{vi} - \omega_L - \Gamma_v/2} \right) \right], \quad (2.42)$$

com [1]

$$\begin{aligned} \Omega_{J_i J_v J_f}^{F_i F_v F_f}(\theta_2, \chi_1, \epsilon_2) = & \sum_{L_1 \lambda_1 L_2 \lambda_2} (-1)^{\lambda_2 + \lambda_1} 4\pi [J_v] \sqrt{\frac{[F_f, F_v, F_i, J_f, J_i]}{[L_2, L_1]}} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_v \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & L_1 & J_v \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \\ & \begin{Bmatrix} F_f & L_2 & F_v \\ J_v & I & J_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} F_i & L_1 & F_v \\ J_v & I & J_i \end{Bmatrix} \Theta_{L_1 L_2}^{\lambda_1, \lambda_2} \bar{M}_{f_v}^{\lambda_2, L_2} \bar{M}_{vi}^{\lambda_1, L_1}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

A expressão (2.43) é composta por uma componente angular dada por $\Theta_{L_1 L_2}^{\lambda_1, \lambda_2}$ que já foi anteriormente definida na equação (2.38) e uma componente radial expressa pelos termos $\bar{M}_{vi}^{\lambda_1 L_1}$ e $\bar{M}_{f_v}^{\lambda_2 L_2}$ que serão descritos *a posteriori*. Por sua vez, os coeficientes de Wigner $3J$ e $6J$ presentes na expressão (2.43) contêm as regras de selecção para os momentos angulares das transições entre os níveis da EF e da EHF.

Tabela 2.1: Valores dos coeficientes de Wigner $3J$ e $6J$ para transições $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_v}$, para um ião com spin nuclear $I = 9/2$.

Ordem multipolar	F_i	F_v	$3J$	$6J$
1	4	3	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{6}$
2	4	3	$\frac{-1}{\sqrt{10}}$	$\frac{-1}{10\sqrt{3}}$
1	4	4	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{\sqrt{11/2}}{6}$
2	4	4	$\frac{-1}{\sqrt{10}}$	$\frac{\sqrt{7}}{30}$
1	4	5	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{-1}{3\sqrt{10}}$
2	4	5	$\frac{-1}{\sqrt{10}}$	$\frac{-1}{5\sqrt{3}}$
1	4	6	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0
2	4	6	$\frac{-1}{\sqrt{10}}$	$\frac{1}{5\sqrt{2}}$

Parte radial

Os termos $\bar{M}_{vi}^{\lambda_1 L_1}$ e $\bar{M}_{f_v}^{\lambda_2 L_2}$ presentes na expressão (2.43) correspondem a parte radial da função de onda do ião e têm duas componentes. A primeira componente está associada aos multipolos magnéticos

e é dada por [42]

$$\bar{M}_{fi}^{0L} = \frac{2L+1}{[L(L+1)]^{1/2}} (\kappa_f + \kappa_i) I_L^+ . \quad (2.44)$$

A segunda componente está associada aos multipolos eléctricos que é dada por [42]

$$\begin{aligned} \bar{M}_{fi}^{1L} = & \left(\frac{L}{L+1} \right)^{1/2} [(\kappa_f - \kappa_i) I_{L+1}^+ + (L+1) I_{L+1}^-] \\ & - \left(\frac{L+1}{L} \right)^{1/2} [(\kappa_f - \kappa_i) I_{L-1}^+ - L I_{L-1}^-] , \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde

$$I_L^\pm = \int_0^\infty (P(r)_f Q(r)_i \pm P(r)_i Q(r)_f) j_L \left(\frac{\omega_{vi}}{c} \right) dr , \quad (2.46)$$

sendo que $P(r)$ e $Q(r)$ são a componente maior e menor da equação de Dirac e κ é o número quântico relativista que é definido da seguinte forma

$$\kappa = \begin{cases} -(j + \frac{1}{2}), & \text{se } l = j - \frac{1}{2} . \\ +(j + \frac{1}{2}), & \text{se } l = j + \frac{1}{2} . \end{cases} \quad (2.47)$$

O produto $(\bar{M}_{fv}^{\lambda_2 L_2} \bar{M}_{vi}^{\lambda_1 L_1})$ presente na expressão (2.43) corresponde ao produto dos elementos de matriz radiais $(\bar{M}_{iv}^{\lambda_1 L_1})$ associados à excitação do electrão com os elementos de matriz radiais $(\bar{M}_{vf}^{\lambda_2 L_2})$ associados ao decaimento do electrão. Tendo em conta o multipolo eléctrico e o limite não-relativista ($c \rightarrow \infty$) da expressão (2.46), pode-se demonstrar que [1]

$$\lim_{c \rightarrow \infty} \bar{M}_{fv}^{11} \bar{M}_{vi}^{11} = \alpha^2 \omega_{vi} \omega_{fv} \mathcal{S}_{fvi} , \quad \mathcal{S}_{fvi} = \langle n_f | r | n_i \rangle \langle n_i | r | n_f \rangle , \quad (2.48)$$

onde $\langle n_f | r | n_i \rangle \langle n_i | r | n_f \rangle$ é o produto entre os elementos de matriz radiais não-relativistas do decaimento com os elementos de matriz radiais não-relativistas de excitação do electrão. Deste limite pode-se derivar as secções eficazes diferenciais presentes nas referências [1, 3].

Cálculo relativista e não-relativista

Uma vez que o electrão da camada 2s dos iões em estudo está sujeito a uma elevada carga nuclear, estes iões apresentam um carácter relativista. Torna-se assim pertinente realizar uma análise comparativa dos efeitos de IQ obtidos com base num método de cálculo relativista e não-relativista. O carácter relativista dos iões em estudo é expresso através componente radial da função de onda do ião dada pela equação (2.44) e pela equação (2.45). Como ilustrado na Figura 2.5 no limite não-relativista ($Z \leq 10$) a sobreposição dos elementos de matriz radiais relativistas $(M_{fv}^{11} M_{iv}^{11})$ relativamente aos elementos de matriz radiais não-relativista $(\alpha^2 \omega_{iv} \omega_{fv} \mathcal{S}_{fvi})$ é igual a dois (2). Assim, para o cálculo dos efeitos de interferência quântica com base no método relativista os elementos de matriz radiais $(\bar{M}_{fv}^{L_1 \lambda_1} \bar{M}_{iv}^{L_2 \lambda_2})$ são dados pelas equações (2.44) e (2.45), considerando os multipolos eléctricos e magnéticos de primeira e segunda ordem. No cálculo dos efeitos de interferência quântica com base no método não-relativista os elementos de matriz radiais $(\bar{M}_{fv}^{L_1 \lambda_1} \bar{M}_{iv}^{L_2 \lambda_2})$ são igualados ao valor 2 (dois) da aproximação não-relativista e apenas é considerado o multipolo eléctrico de primeira ordem.

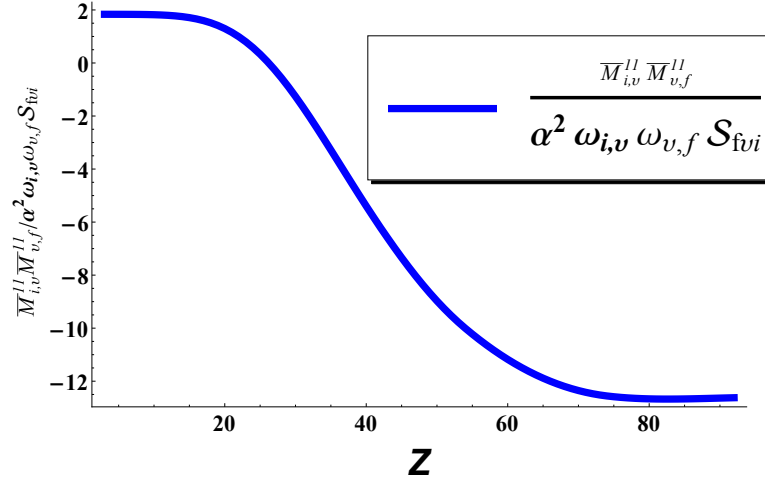


Figura 2.5: Sobreposição dos elementos de matriz radiais relativistas ($M_{i,v}^{11} M_{v,f}^{11}$) com os elementos de matriz radiais não-relativistas ($\alpha^2 \omega_{i,v} \omega_{v,f} S_{fvi}$) ao longo da SIE do lítio.

2.2.6 Secção eficaz diferencial relativa aos estados ressoantes e não-ressonantes

Aplicando a amplitude de transição obtida em (2.42) na equação da secção diferencial (2.30), obtém-se [1]

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega_L, \theta_2, \chi_1) &= \frac{1}{(2F_i + 1)} \sum_{\substack{m_i, F_f \\ m_f, J_f \\ \epsilon_2}} \left| \sum_{F_v} \sum_{J_v} \left[\left(\frac{\left[\Omega_{J_i J_v J_f}^{F_i F_v F_f} \right]}{\omega_{vi} - \omega_L - i\Gamma_v/2} \right) \right] \right|^2 \\
 &= \frac{1}{(2F_i + 1)} \sum_{\substack{m_i, F_f \\ m_f, J_f \\ \epsilon_2}} \sum_{F_v} \sum_{J_v} \left[\left(\frac{\left[\Omega_{J_i J_v J_f}^{F_i F_v F_f} \right]}{\omega_{vi} - \omega_L - i\Gamma_v/2} \right) \right] \sum_{F_{nv}} \sum_{J_{nv}} \left[\left(\frac{\left[\Omega_{J_i J_{nv} J_f}^{F_i F_{nv} F_f} \right]^\dagger}{\omega_{vi} - \omega_L - i\Gamma_v/2} \right) \right] \\
 &= \frac{\omega_{vi} \omega_{fv}^3 S_{fvi}^2}{(2F_i + 1)} \times \\
 &\quad \left(\sum_{F_v, J_v} \frac{\Lambda_{J_i J_v}^{F_i F_v}(\theta_2, \chi_1, \omega_L)}{(\omega_{vi} - \omega_L)^2 + (\Gamma_v/2)^2} + \sum_{(F_{nv}, J_{nv}) > (F_v, J_v)} \frac{\Xi_{J_i J_v J_{nv}}^{F_i F_v F_{nv}}(\theta_2, \chi_1, \omega_L)}{(\omega_{vi} - \omega_L - i\Gamma_v/2)(\omega_{nvi} - \omega_L + i\Gamma_v/2)} \right),
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

onde (ω_{nvi}) representa a frequência associada a transição do estado inicial (i) para o estado excitado não-ressonante (nv) com

$$\Lambda_{J_i J_v}^{F_i F_v}(\theta_2, \chi_1, \omega_L) = \sum_{m_i, F_f, m_f, J_f, \epsilon_2} \left| \Omega_{J_i J_v J_f}^{F_i F_v F_f}(\theta_2, \chi_1, \omega_L, \epsilon_2) \right|^2. \tag{2.50}$$

e

$$\Xi_{J_i J_v J_{nv}}^{F_i F_v F_{nv}}(\theta_2, \chi_1, \omega_L) = 2\text{Re} \left[\sum_{\substack{m_i, F_f \\ m_f, J_f, \epsilon_2}} \Omega_{J_i J_v J_f}^{F_i F_v F_f}(\theta_2, \chi_1, \omega_L, \epsilon_2) \Omega_{J_i J_{nv} J_f}^{F_i F_{nv} F_f}(\theta_2, \chi_1, \omega_L, \epsilon_2)^\dagger \right]. \quad (2.51)$$

Na expressão (2.49) o primeiro somatório corresponde às transições para estados ressonantes $[J_v, F_v]$, sendo que o termo (Λ) inclui a soma das probabilidades de transição de todos os estados ressonantes.

O segundo somatório corresponde aos termos de interferência quântica entre os estados ressonantes e os estados não-ressonantes $[J_{nv}, F_{nv}]$ e o termo (Ξ) inclui todos os termos de interferência que podem causar efeitos de interferência quântica, por este motivo (Ξ) expressa os efeitos de interferência quântica entre os estado ressonantes e os estados não-ressonantes.

Soma coerente e incoerente

A soma das probabilidades de transição relativa à expressão (2.49) designa-se por soma coerente, uma vez que resulta da soma dos termos do primeiro somatório (transições ressonantes) da equação (2.49) com os termos do segundo somatório (termos de interferência quântica entre estados) da equação (2.49). Se na secção eficaz diferencial dada pela equação (2.49) considerar-se nula a soma dos termos de interferência quântica (Ξ) , a soma das probabilidades de transição expressa pela equação (2.49) designa-se ser por soma incoerente. Em conclusão, a soma coerente distingue-se da soma incoerente pelo facto de a soma coerente incluir os termos de interferência quântica. Uma vez que $\Lambda_{J_i J_v}^{F_i F_v}(\theta_2, \chi_1, \omega_L)$ é uma constante, tem-se que

$$\frac{\Lambda_{J_i J_v}^{F_i F_v}(\theta_2, \chi_1, \omega_L)}{(\omega_{vi} - \omega_L)^2 + (\Gamma_v/2)^2} \propto \frac{\Gamma/2\pi}{(\omega_{vi} - \omega_L)^2 + (\Gamma_v/2)^2}, \quad (2.52)$$

o termo do lado direito da equação (2.52) é a função de Lorentz, $\hbar\omega_{vi}$ é a energia de ressonância do estado excitado. Assim, o ajuste da secção eficaz diferencial relativa à soma dos termos incoerentes pode ser feito por intermédio da soma de funções de Lorentz [43]. Desta forma os máximos do espectro da secção eficaz diferencial correspondem as energias de ressonância da transição do estado fundamental para os estados excitados. A estas energias de ressonância relativas aos máximos da secção eficaz diferencial, designar-se-á ao longo do presente texto como energias de ressonância ou simplesmente ressonâncias.

Cálculo computacional 3

A implementação computacional realizou-se em três fases distintas;

1. Na primeira fase realizou-se a caracterização da estrutura fina e hiperfina em termos de energia e largura a meia altura para os iões escolhidos como casos de estudo. A caracterização da estrutura fina e hiperfina é necessária porque o cálculo computacional da secção eficaz diferencial tem como parâmetros de entrada as energias dos estados da EF e da EHF, e as larguras a meia altura das transições em estudo.
2. Posteriormente, procedeu-se ao cálculo dos coeficientes da parametrização relativistas e não-relativistas da soma dos termos incoerentes (Λ) e da soma dos termos de interferência quântica (Ξ) para ângulos de polarização do fóton incidente $\chi_1 = 0^\circ$ (\parallel) e $\chi_1 = 90^\circ$ (\perp).
3. Na terceira fase da implementação computacional criou-se uma base de dados por forma a integrar-se todos os parâmetros necessários ao cálculo da secção eficaz diferencial, nomeadamente: as energias da EF e EHF, a largura a meia altura dos iões em estudo, e os coeficientes de parametrização dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ) calculados na fase dois da implementação computacional. Nesta terceira e última fase implementou-se também uma rotina para o cálculo da secção eficaz diferencial e outra para o cálculo dos desvios das energias de ressonância.

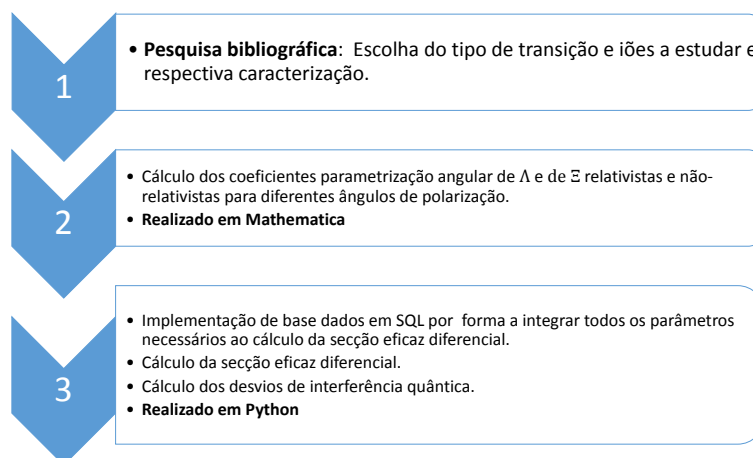


Figura 3.1: Diagrama da implementação computacional.

3.1 Cálculo das energias dos níveis da estrutura fina e hiperfina

Para a caracterização da energia de transição $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ e respectiva largura a meia altura utilizou-se os resultados obtidos na referência [44], onde foi usado um modelo semi-empírico para calcular a energia de separação e o tempo médio de vida das transições anteriormente mencionadas.

Uma vez identificadas as energias de separação da estrutura fina passou-se ao cálculo da energia de separação da estrutura hiperfina. Para o nível $2s_{1/2}$ foi necessário calcular previamente o valor da constante de interacção hiperfina dipolar magnética (A_{EHF}) através da expressão (3.1). A expressão (3.1) contém as correcções associadas aos efeitos relativistas e as correcções de primeira ordem associadas aos efeitos de interacção entre electrões [24]

$$A_{EHF} = \frac{\alpha(\alpha Z)^3}{n^3} \frac{m_e}{m_p} \frac{1}{IJ(J+1)(2L+1)} \frac{\mu}{\mu_N} m_e c^2 a_{cor}(1 - \delta_{cor})(1 - \epsilon_{cor}) + \frac{b_{cor}}{Z}, \quad (3.1)$$

onde c é a velocidade da luz (unidades relativistas, $c = 1$), μ_N é o magnetão nuclear, δ_{cor} é o factor de correcção da distribuição de carga nuclear, a_{cor} é o factor de correcção relativista e b_{cor} corresponde ao factor de correcção da interacção entre electrões de primeira ordem. Os factores de correcção anteriormente mencionados foram obtidos na referência [35].

Pressupondo uma distribuição pontual do momento angular nuclear I , a energia de separação da estrutura hiperfina ΔE_{EHF} do nível $2s_{1/2}$ é dada de forma aproximada pela expressão

$$\Delta E_{EHF} = \frac{1}{2} h [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] A_{EHF}, \quad (3.2)$$

onde A_{EHF} é constante de interacção hiperfina dipolar magnética previamente calculada e h a é constante Planck. Para o nível $2p_{3/2}$, o cálculo rigoroso da energia de separação da estrutura hiperfina exige a inclusão da constante da interacção hiperfina quadripolar eléctrica [24]. Por este motivo a energia de separação da estrutura hiperfina do nível ($2p_{3/2}$) é obtida directamente dos valores de referência presentes no artigo [24].

3.2 Dependência angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ)

As dependências angulares dos termos incoerentes (Λ) dada pela expressão (2.50) e dos termos de interferência quântica (Ξ) dada pela expressão (2.51) podem ser expressas através de uma parametrização angular que é dada por [1]

$$\Lambda(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}) = a_0 P_0(\cos \varsigma) + a_2 P_2(\cos \varsigma) , \quad \Xi(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}, \omega_{nvi}) = b_0 P_0(\cos \varsigma) + b_2 P_2(\cos \varsigma) , \quad (3.3)$$

onde $P_n(\cos \varsigma)$ é o polinômio de Legendre de ordem n e (ς) é o ângulo de parametrização angular de (Λ) e (Ξ). O ângulo de parametrização angular (ς) corresponde ao ângulo entre o vector de onda do fóton emitido (\vec{k}_2) e o vector de polarização do fóton incidente ($\vec{\epsilon}_1$). Este ângulo ς encontra-se representado na Figura 3.2, e é definido pela seguinte equação

$$\varsigma = \arccos(\cos \chi_1 \sin \theta_2) . \quad (3.4)$$

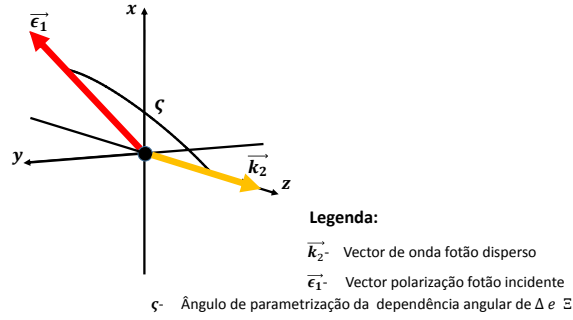


Figura 3.2: Ângulo ς relativo à parametrização da dependência angular dos termos incoerentes (Λ) dos termos de interferência quântica (Ξ).

Consegue-se deste modo exprimir o termo incoerente (Λ) associado a uma transição ressonante (ω_v) e o termo de interferência quântica (Ξ) associado a interferência de uma transição ressonante (ω_v) com uma transição não-ressonante (ω_{nv}) em função ângulo de polarização do fóton incidente (χ_1) e do ângulo de dispersão do fóton emitido (θ_2). Por forma a simplificar o cálculo computacional, fixa-se o ângulo de dispersão

$$\theta_2 = \pi/2 \Rightarrow \cos(\varsigma) = \cos(\chi_1) . \quad (3.5)$$

Após uma mudança de variável dada por

$$\cos \chi_1 \rightarrow x , \quad (3.6)$$

é possível obter os coeficientes de parametrização através do seguinte cálculo

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 \Lambda(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}) P_n(x) dx , \\ b_n &= \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 \Xi(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}, \omega_{nvi}) P_n(x) dx , \end{aligned} \quad (3.7)$$

o termo $(2n + 1)/2$ é a constante de normalização dos polinómios de Legendre, $\Lambda(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi})$ corresponde ao termo da transição ressonante ($i \rightarrow v$) e $\Xi(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}, \omega_{nvi})$ corresponde ao termo de interferência quântica da transição ressonante ($i \rightarrow v$) com a transição não-ressonante ($i \rightarrow nv$). O termo $\Lambda(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi})$ é calculado pela rotina *LambdaFunDrake* (C.3) e o termo $\Xi(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}, \omega_{nvi})$ é calculado pela rotina *XiFunDrake* (C.4)

3.3 Cálculo dos coeficientes de parametrização angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ)

Esta parte do trabalho foi implementada em *Matematica*[®], onde se desenvolveu um conjunto de rotinas com objectivo de se calcular os coeficientes de parametrização angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ). Cada rotina corresponde a uma parte específica das expressões (2.50) e (2.51). Estas rotinas foram posteriormente utilizadas numa rotina principal *Tablecoef* (C.5) que calcula e exporta os coeficientes de parametrização angular de Λ e Ξ . Os parâmetros de entrada relativos às energias dos estados excitados e respectivas larguras a meia altura são expressos em unidades atómicas.

A rotina *Tablecoef* é composta por um ciclo principal que percorre todos os estados ressonantes que por sua vez, inclui um subciclo sobre todos os estados não-ressonantes. Para cada ciclo associado a um estado ressonante calculam-se os coeficientes a_0, a_2 . De forma semelhante, para cada subciclo sobre as transições não-ressonantes calculam-se os coeficientes b_0 e b_2 . Após o cálculo de cada coeficiente a_n e b_n estes são guardados numa base de dados em conjunto com os números quânticos do estado inicial (i), do estado excitado ressonante (v) e do estado excitado não-ressonante (nv) da transição em estudo.

3.4 Cálculo dos efeitos de interferência quântica

O cálculo dos efeitos de interferência quântica foi realizado através de duas rotinas desenvolvidas em Python. A primeira rotina *CrossSection* (E.1) calcula a secção eficaz diferencial com base na expressão (2.49), por intermédio dos coeficientes parametrização angular a_0, a_2 de $\Lambda(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi})$ e b_0, b_2 de $\Xi(\theta_2, \chi_1, \omega_{vi}, \omega_{nvi})$, dos valores da largura a meia altura e da energias da EF e da EHF. Todos estes parâmetros de entrada da rotina *CrossSection* encontram-se armazenados numa base de dados SQL (D.1) previamente implementada em Python. Como resultado da rotina *CrossSection* obtém-se:

- A soma incoerente total (S. inc. Total) que representa a secção eficaz diferencial de todas as transições ressonantes e não inclui a soma dos termos de interferência quântica.
- A soma coerente total (S. coe. Total) que representa a secção eficaz diferencial de todas as transições ressonantes e inclui a soma dos termos de interferência quântica.
- A soma incoerente de uma única ressonância (S. inc. $F = F_v$) que representa apenas a secção eficaz diferencial da transição $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_v}$ e não inclui a soma dos termos de interferência quântica.
- A soma coerente de uma única ressonância (S. coe. $F = F_v$) que representa apenas a secção eficaz diferencial da transição $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_v}$ e inclui a soma dos termos de interferência quântica.

Esta rotina é composta por um ciclo principal que percorre todos os estados ressonantes que por sua vez, inclui um subciclo sobre todos os estados não-ressonantes. Todas as somas coerentes são modeladas pela equação (2.49). Do mesmo modo, todas as somas incoerentes são modeladas pela equação (2.49) mas neste caso todos os termos de IQ são considerados nulos.

Para calcular os desvios dos máximos da secção eficaz diferencial devido aos efeitos de IQ implementou-se a função *ShiftCrossSec* (E.2), esta rotina pressupõe a existência de um máximo, e dado um ponto genérico p procura o máximo mais próximo. Os parâmetros de entrada desta rotina são a largura a meia altura (Γ), a energia do nível da EF e a energia do nível da EHF. O espectro da secção eficaz diferencial é obtido directamente da função *CrossSection*. Os desvios de interferência quântica são calculados por

$$\bar{\delta} = \frac{\hbar(\omega_{vi} - \omega_{sim})}{\Gamma}, \quad (3.8)$$

onde $(\hbar\omega_{vi})$ é a energia de ressonância teórica e $(\hbar\omega_{sim})$ é a energia do máximo mais próximo da secção eficaz diferencial, (Γ) é largura a meia da transição em estudo.

Discussão de resultados 4

Neste capítulo apresentam-se e discutem-se os resultados obtidos neste trabalho, nomeadamente:

1. Realiza-se a comparação entre a amplitude da secção eficaz diferencial relativista e não-relativista;
2. Realiza-se a comparação entre os desvios das energias de ressonância da secção eficaz diferencial relativista e não-relativista;
3. Realiza-se a comparação entre os desvios das energias de ressonância da secção eficaz diferencial para diferentes ângulos de polarização do fóton incidente.
4. Discute-se a dependência angular dos termos de interferência quântica;
5. Discute-se os efeitos de interferência quântica em estados energeticamente distantes e para iões com o mesmo spin nuclear;
6. Discute-se a contribuição dos diferentes termos multipolares nos efeitos de interferência quântica;
7. Discute-se a validade e correcção do cálculo realizado;
8. Discute-se a relevância dos efeitos de interferência quântica na secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$.

4.1 Comparação entre a secção eficaz diferencial relativista e a secção eficaz diferencial não-relativista

Na Figura 4.1 encontra-se representada a secção eficaz diferencial do $^{151}\text{Eu}^{+60}$ em função da diferença de energia entre a radiação de excitação ($\hbar\omega_L$) e a energia da transição (ΔE_{FS})

$$\Delta E_{FS} = E_{2p_{3/2}} - E_{2s_{1/2}} . \quad (4.1)$$

As ressonâncias com $F = 1$, $F = 2$ e $F = 3$ representam transições

$$2s_{1/2}^{F=2} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=\nu} , \quad \nu = 1, 2, 3 . \quad (4.2)$$

A Figura 4.1 foi obtida por intermédio dos coeficientes de parametrização angular dos termos incoerentes (Λ) e dos termos de interferência quântica (Ξ) presentes na Tabela 4.1.

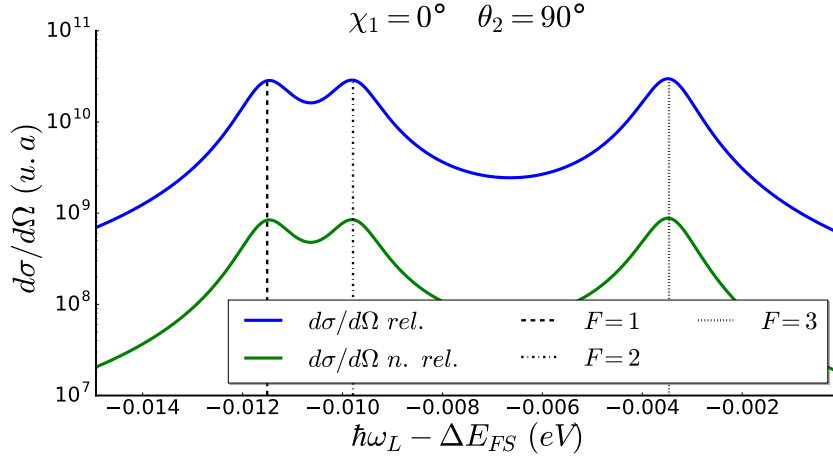


Figura 4.1: Secção eficaz diferencial relativista (azul) e não-relativista (verde) do $^{151}\text{Eu}^{60+}$ obtida através dos coeficientes de parametrização da Tabela 4.1, para um ângulo de dispersão $\theta_2 = 90^\circ$ e um ângulo de polarização $\chi_1 = 0^\circ$.

Tabela 4.1: Coeficientes de parametrização de Λ e Ξ para transições $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_\nu}$ do $^{151}\text{Eu}^{60+}$.

F_i	F_ν	$F_{n\nu}$	a_0^{NR}	a_2^{NR}	b_2^{NR}	a_0^{R}	a_2^{R}	b_0^{R}	b_2^{R}
2	1	1	0.417	-0.00417	0	14.1	-1.41×10^{-1}	0	0
2	1	2	0.417	-0.00417	-0.0972	14.1	-1.41×10^{-1}	-2.42×10^{-3}	-3.28
2	1	3	0.417	-0.00417	-0.311	14.1	-1.41×10^{-1}	-4.43×10^{-3}	-10.5
2	1	4	0.417	-0.00417	0	14.1	-1.41×10^{-1}	0	0
2	2	1	0.540	-0.135	0	18.3	-4.56	0	0
2	2	2	0.540	-0.135	0	18.3	-4.56	0	0
2	2	3	0.540	-0.135	-0.173	18.3	-4.56	1.19×10^{-3}	-5.84
2	2	4	0.540	-0.135	0	18.3	-4.56	-5.94×10^{-3}	5.94×10^{-3}
2	3	1	0.432	0.0259	0	14.6	8.76×10^{-1}	0	0
2	3	2	0.432	0.0259	0	14.6	8.76×10^{-1}	0	0
2	3	3	0.432	0.0259	0	14.6	8.76×10^{-1}	0	0
2	3	4	0.432	0.0259	0	14.6	8.76×10^{-1}	-7.42×10^{-3}	7.43×10^{-3}

4.1. COMPARAÇÃO ENTRE A SECÇÃO EFICAZ DIFERENCIAL RELATIVISTA E A SECÇÃO EFICAZ DIFERENCIAL NÃO-RELATIVISTA

Cada linha da Tabela 4.1 contém os coeficientes dos termos de interferência (b_0 e b_2) e os coeficientes dos termos incoerentes (a_0 e a_2) relativos à interferência de um estado não-ressonante (F_{nv}) com um estado ressonante (F_v). Assim, a segunda linha apresenta os resultados dos coeficientes de parametrização angular de (Λ) e (Ξ) associados à interferência da transição não-ressonante

$$2s_{1/2}^{F=2} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=2} ,$$

com a transição ressonante

$$2s_{1/2}^{F=2} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=1} .$$

As restantes tabelas dos coeficientes de parametrização angular dos iões em estudo encontram-se no Apêndice B. A análise da Tabela 4.1 permite identificar que o quociente entre os coeficientes de interferência quântica de ordem zero (b_0) relativistas e não-relativistas é aproximadamente 33. Para os coeficientes de interferência quântica de ordem dois (b_2) verifica-se a mesma relação, sendo este resultado igualmente aplicável para os coeficientes dos termos incoerentes de ordem zero (a_0) e ordem dois (a_2). A comparação entre a amplitude da secção eficaz diferencial relativista e não-relativista de todos os iões em estudo neste trabalho é apresentada na Figura 4.2.

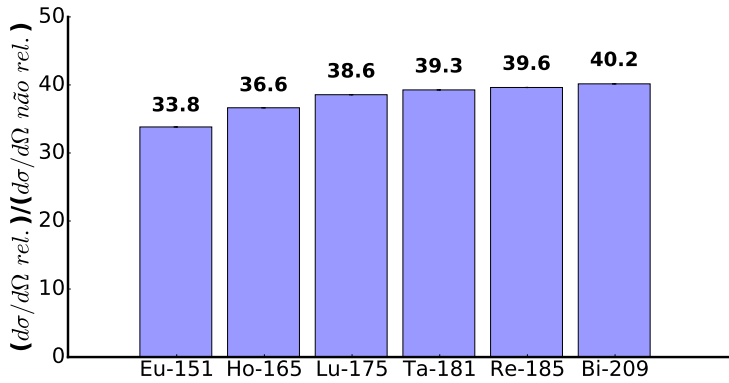


Figura 4.2: Razão entre a amplitude da secção eficaz diferencial relativista e a amplitude da secção eficaz diferencial não-relativista.

Verifica-se assim que a amplitude da secção eficaz diferencial relativista é superior a amplitude da secção eficaz diferencial não-relativista para todos os iões em estudo. Este resultado é espectável tendo em conta a relação entre a função de onda relativista e a aproximação não-relativista dada por

$$\left(M_{fv}^{11} M_{iv}^{11} \right) / \left(\alpha^2 \omega_{iv} \omega_{vf} S_{fvi} \right) . \quad (4.3)$$

que varia com o número atómico segundo o gráfico da Figura 2.5. O valor da razão dada pela equação (4.3) para iões com número atómico ($40 < Z < 49$) é dada por,

$$\frac{11^2}{2^2} \leq \frac{\text{Amplitude secção eficaz diferencial relativista}}{\text{Amplitude secção eficaz diferencial não-relativista}} \leq \frac{13^2}{2^2} . \quad (4.4)$$

Portanto, a razão entre a amplitude da secção eficaz diferencial relativista e a amplitude da secção eficaz diferencial não-relativista deve tomar valores compreendidos entre 30 a 42, valores estes que estão em concordância com os resultados obtidos.

Adicionalmente, observa-se pela Figura 4.3 que a amplitude da secção eficaz diferencial diminui com o número atómico.

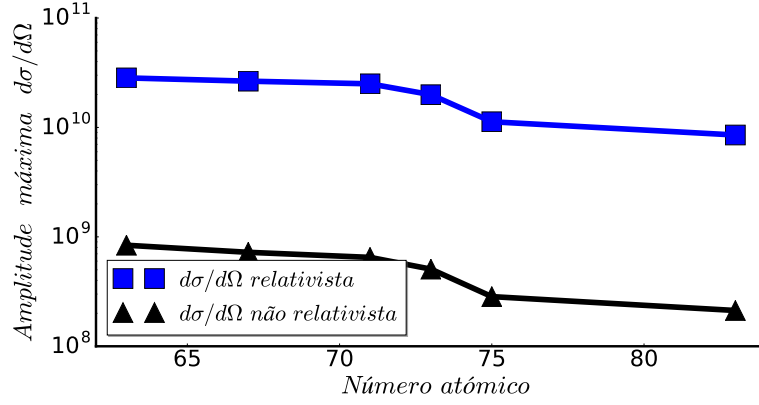


Figura 4.3: Amplitude da secção eficaz diferencial relativista e não-relativista.

Este decréscimo com o número atómico deve-se ao termo \mathcal{S}_{fvi} que se encontra fora do somatório da equação (2.49), onde

$$\mathcal{S}_{fvi} \propto \frac{1}{Z^2}. \quad (4.5)$$

Apresenta-se na Figura 4.4 os resultados relativos à comparação entre os desvios das energias de ressonância da secção eficaz diferencial relativista e não-relativista.

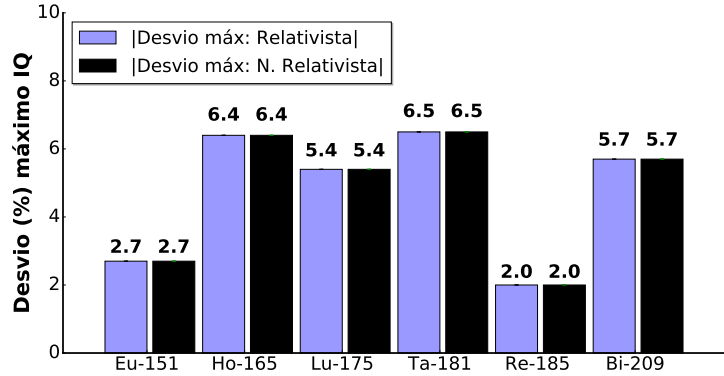


Figura 4.4: Comparação dos desvios de interferência quântica observados na secção eficaz diferencial relativista e não-relativista.

Constata-se assim que os desvios de interferência quântica são independentes do carácter relativista da componente radial da função de onda dos iões altamente carregados. Este resultado é também espectável tendo em conta que a relação entre a função de onda relativista e a função de onda não-relativista representada na Figura 2.5 afecta igualmente os termos incoerentes (Λ) e os termos de interferência quântica (Ξ). Assim, os elementos de matriz radiais ($M_{fv}^{L_1\lambda_1} M_{iv}^{L_2\lambda_2}$) relativistas e não-relativistas funcionam como um factor de escala que afectam de igual forma os termos incoerentes e os termos de interferência quântica. Ou seja, a proporção entre os termos incoerentes e os termos de interferência quântica mantem-se igual. Este factor de proporção é o quociente entre os termos

relativistas e não-relativistas de igual ordem que anteriormente se identificou para a Tabela 4.1. Conclui-se assim que o carácter relativista da componente radial da função de onda dos iões altamente carregados apenas afecta a amplitude da secção eficaz diferencial.

4.2 Dependência angular dos termos de interferência quântica

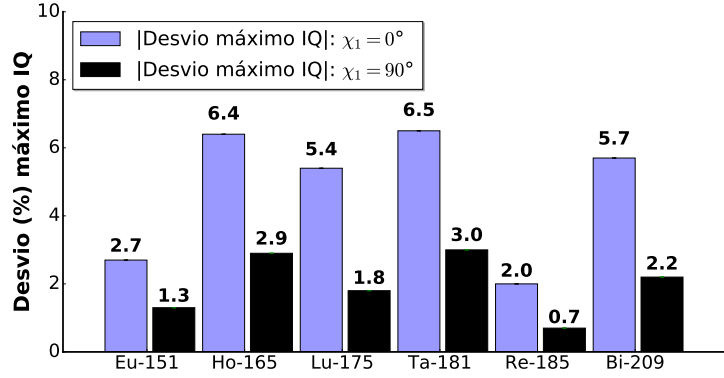


Figura 4.5: Valor máximo do desvio das energias de ressonância dos iões em estudo para um ângulo de polarização do fotão incidente $\chi_1 = 0^\circ$ e um ângulo de dispersão $\theta_2 = 90^\circ$.

Da observação do gráfico da Figura 4.5 verifica-se que os desvios de IQ apresentam uma maior amplitude para um ângulo de polarização do fotão incidente $\chi_1 = 0^\circ$. A análise da Tabela 4.1 relativa aos coeficientes de parametrização angular dos termos incoerentes e dos termos de interferência quântica do $^{151}\text{Eu}^{+60}$ permite identificar que os coeficientes de segunda ordem (b_2) da parametrização angular dos termos de interferência quântica (Ξ) podem ter uma ordem de grandeza até quatro vezes superior a ordem grandeza dos coeficientes de ordem zero (b_0) da já referida parametrização angular. É assim válido realizar a seguinte aproximação

$$b_0^{\text{NR}} \approx b_0^{\text{R}} = 0, \quad (4.6)$$

desta forma

$$\Xi \approx b_2^{\text{R}} P_2(\cos \varsigma) = \frac{1}{2} \left(-1 + 3 \cos(\chi)^2 \sin(\theta)^2 \right). \quad (4.7)$$

A equação (4.7) expressa a dependência dos termos de interferência quântica (Ξ) com o ângulo de dispersão θ_2 do fotão emitido e com ângulo de polarização do fotão incidente χ_1 . A Figura 4.6 representa a variação da parametrização $b_0 + b_2 \cdot P_2(\cos(\varsigma))$ em função do ângulo de polarização χ_1 do fotão incidente e do coeficiente de segunda ordem (b_2), para $b_0 = 0$ e fixando o ângulo de dispersão do fotão emitido em ($\theta_2 = \pi/2$), onde se constata que $b_2 P_2(\cos \varsigma)$ tem um ponto de inflexão para um ângulo igual a $\chi_1 = 55.6^\circ$.

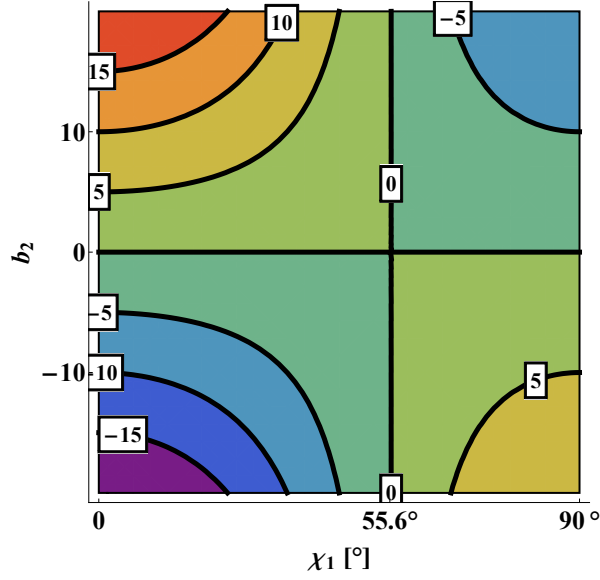


Figura 4.6: Variação da parametrização $b_0 + b_2 \cdot P_2(\cos(\chi))$ em função do ângulo de polarização χ_1 do fóton incidente e do coeficiente de segunda ordem b_2 , para $b_0 = 0$ e $\theta_2 = 90^\circ$, onde se identifica um ponto de inflexão em $\chi = 55.6^\circ$.

De igual forma, fixando o ângulo de polarização do fóton incidente em $\theta_2 = \pi/4$ obtém-se que $b_0 P_0(\cos \zeta) + b_2 P_2(\cos \zeta)$ tem um ponto de inflexão em $\chi_1 = 35.3^\circ$.

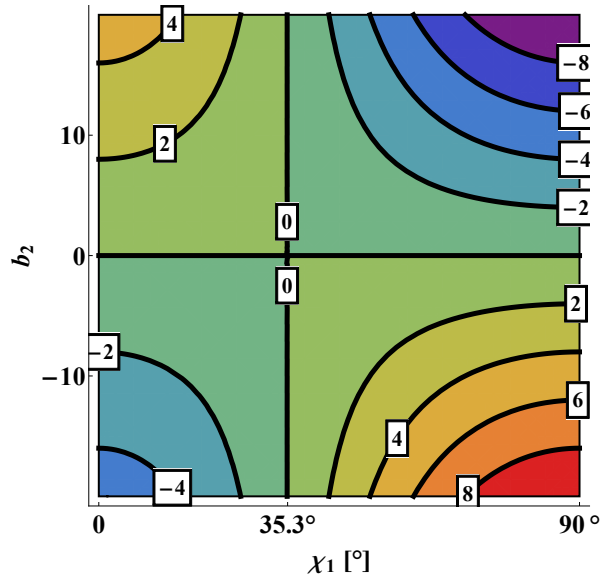


Figura 4.7: Variação da parametrização $b_0 + b_2 \cdot P_2(\cos(\chi))$ em função do ângulo de polarização χ_1 do fóton incidente e do coeficiente de segunda ordem b_2 , para $b_0 = 0$ e $\theta_2 = 45^\circ$, onde se identifica um ponto de inflexão em $\chi = 35.3^\circ$.

Mostra-se assim que é possível minimizar os efeitos de interferência quântica através da escolha dos ângulos de polarização e de observação.

As Figuras 4.8, 4.9 e 4.10 apresentam os efeitos de interferência quântica na secção eficaz diferencial relativista do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, para um ângulo de polarização do fóton incidente ($\chi_1 = 0^\circ$, $\chi_1 = 90^\circ$ e $\chi_1 = 55.6^\circ$) respectivamente. Em cada um destes gráficos apresenta-se a soma coerente total, a soma incoerente total, a soma incoerente relativa à transição ($F = i$) e a soma coerente relativa à transição ($F = i$) da secção eficaz diferencial.

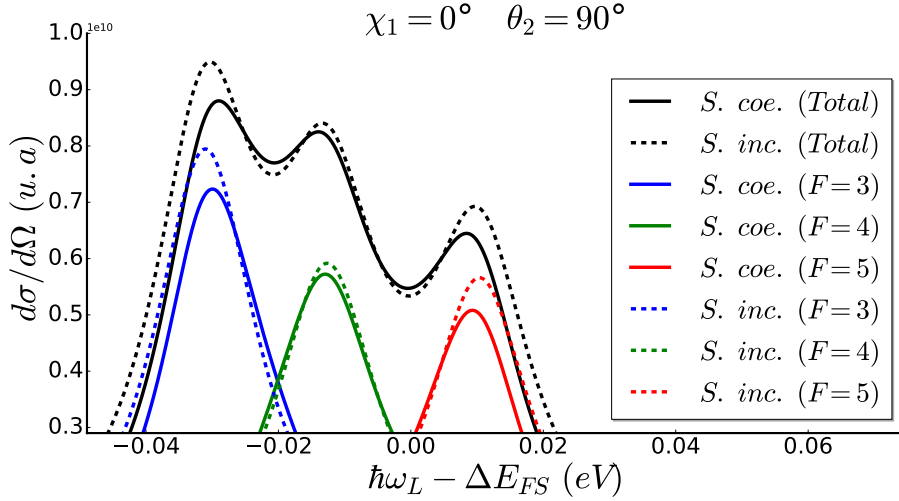


Figura 4.8: Soma dos termos coerentes ($S. \text{coe.}$) e incoerentes ($S. \text{inc.}$) da secção eficaz diferencial relativista do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, para um ângulo de dispersão $\theta_2 = 90^\circ$ e um ângulo de polarização $\chi_1 = 0^\circ$, obtidos através dos coeficientes de parametrização da Tabela B.5.

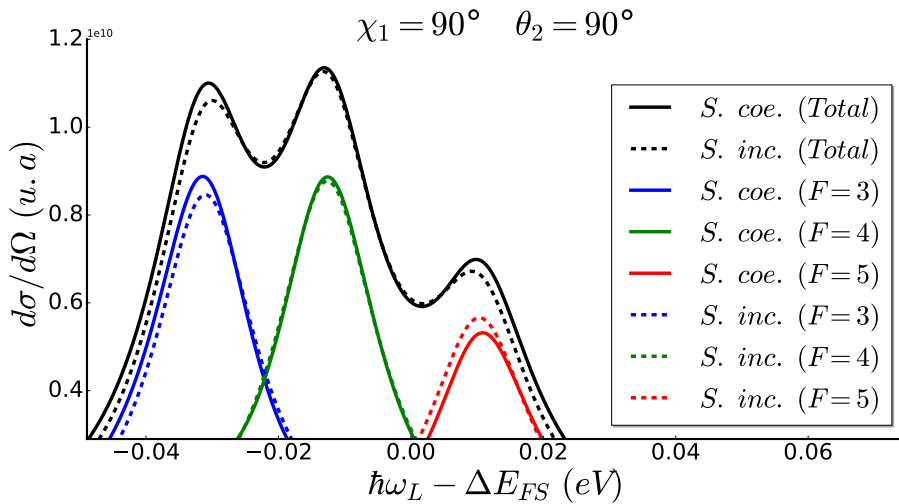


Figura 4.9: Soma dos termos coerentes ($S. \text{coe.}$) e incoerentes ($S. \text{inc.}$) da secção eficaz diferencial relativista do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, para um ângulo de dispersão $\theta_2 = 90^\circ$ e um ângulo de polarização $\chi_1 = 90^\circ$, obtidos através dos coeficientes de parametrização da Tabela B.5.

A Figura 4.10 é a secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$ para um ângulo de polarização do fóton incidente $\chi_1 = 55.6^\circ$, nesta figura, não se verifica nenhuma distinção entre a soma coerente e a soma incoerente de qualquer uma das transições, pode-se assim concluir que para este caso ($\chi_1 = 55.6^\circ$), os efeitos de interferência quântica não são observados. Em oposição, nas Figuras 4.8 e 4.9 é notório o desvio entre os máximos da soma coerente e os máximos da soma incoerente das diferentes transições em estudo.

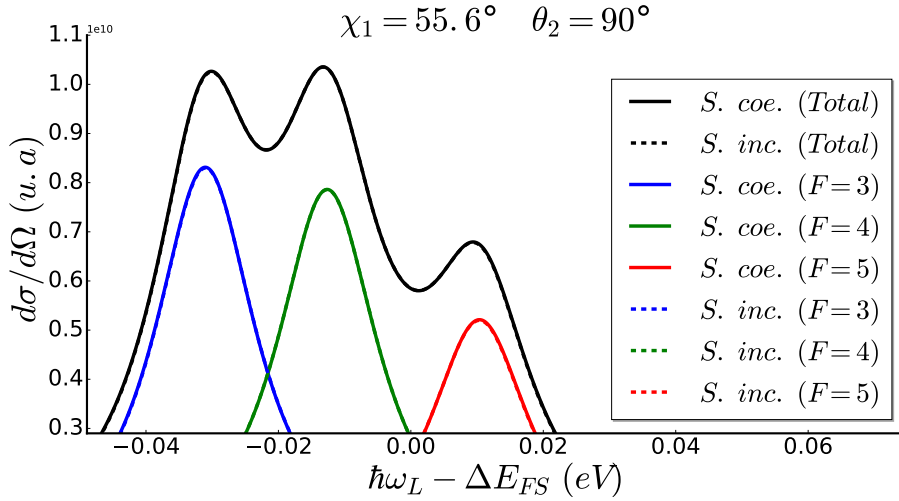


Figura 4.10: Soma dos termos coerentes (S. coe.) e incoerentes (S. inc.) da secção eficaz diferencial relativista do $^{209}\text{Bi}^{80+}$, para um ângulo de dispersão $\theta_2 = 90^\circ$ e um ângulo de polarização $\chi_1 = 55.6^\circ$, obtidos através dos coeficientes de parametrização da Tabela B.5.

A Tabela 4.2 apresenta o resumo dos desvios de interferência observados na secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$ para um ângulo de polarização do fóton incidente $\chi_1 = 0^\circ$ e $\chi_1 = 90^\circ$.

Tabela 4.2: Desvios de IQ ($\bar{\delta}_{\text{QI}}$) na secção eficaz diferencial do $^{209}\text{Bi}^{80+}$ correspondentes a parametrização da Tabela B.5. ($\bar{\delta}^{\parallel} \Rightarrow \chi_1 = 0^\circ$ e $\bar{\delta}^{\perp} \Rightarrow \chi_1 = 90^\circ$).

ν	Relativista				Não Relativista			
	Soma Coerente		Soma Incoerente		Soma Coerente		Soma Incoerente	
	$\bar{\delta}_{\text{Coe}}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Coe}}^{\perp}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Inc}}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Inc}}^{\perp}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Coe}}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Coe}}^{\perp}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Inc}}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{\text{Inc}}^{\perp}(\%)$
$F = 3$	5.7	-2.2	0.0	0.0	5.7	-2.2	0.0	0.0
$F = 4$	-1.6	0.4	0.0	0.0	-1.6	0.4	0.0	0.0
$F = 5$	-5.5	2.7	0.0	0.0	-5.5	2.7	0.0	0.0

Os desvios de IQ $\bar{\delta}_{\text{QI}}(\%)$ apresentados são relativos a Γ .

Estes resultados evidenciam uma forte dependência dos efeitos de interferência quântica com a geometria do processo de dispersão e estão em concordância com o que já foi discutido na página 34 e com os estudos realizados nas referências [1, 3].

4.3 Desvios das energias de ressonância da secção eficaz diferencial para iões com o mesmo spin nuclear

O $^{165}\text{Ho}^{64+}$, o $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e o $^{181}\text{Ta}^{70+}$ têm um spin nuclear ($I = 7/2$), por este motivo a contribuição da componente angular deve ser a mesma para estes três iões. Por esta razão, investigou-se a relação entre os desvios de interferência quântica e a energia de separação dos estados da EHF e a largura a meia altura das transições em estudo. A dependência entre os parâmetros anteriormente citados é apresentada nas Figura 4.11 e 4.12 .

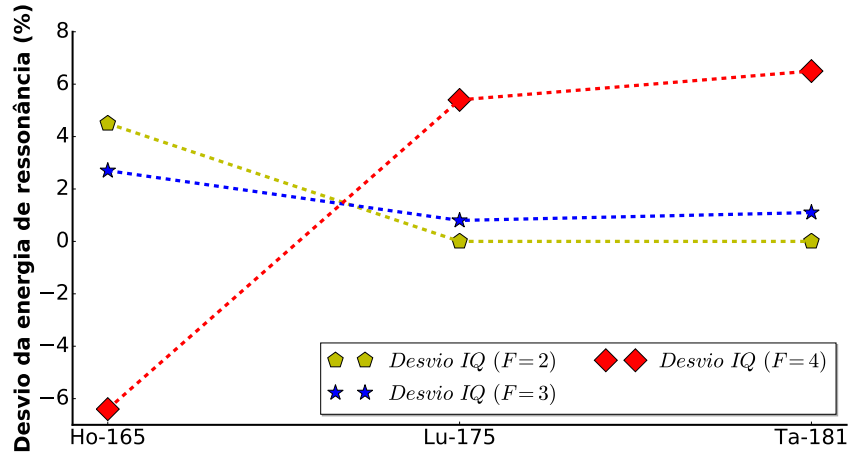


Figura 4.11: (Desvio IQ): Desvio percentual das energias de ressonância ($\bar{\delta} = \frac{\hbar(\omega_{vi}-\omega_{sim})}{\Gamma}$) do $^{165}\text{Ho}^{64+}$, do $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e do $^{181}\text{Ta}^{70+}$.

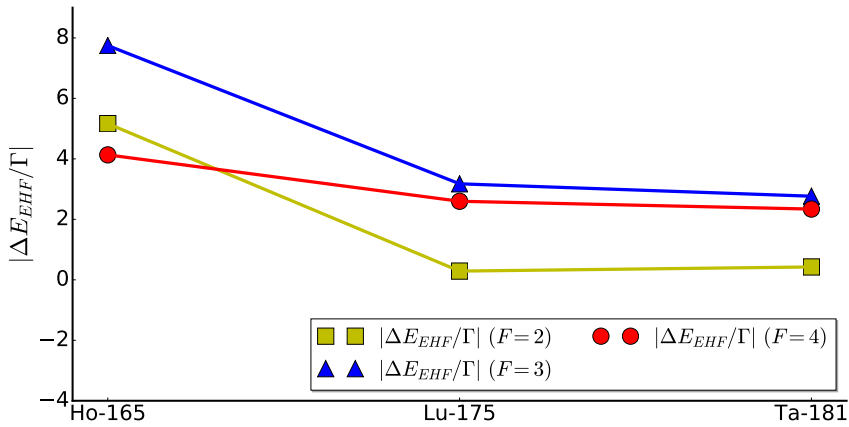


Figura 4.12: $|\Delta E_{EHF}/\Gamma|$: Razão entre a energia de separação dos níveis da estrutura hiperfina ($F = i$) e a largura a meia altura do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. Os valores de $|\Delta E_{EHF}|$ ($F = i$) são calculados pela diferença de energia entre a ressonância ($F = i$) e a energia do nível $2p_{3/2}$. Assim, a razão $|\Delta E_{EHF}|/\Gamma$ é menor para as ressonâncias mais próximas do nível $2p_{3/2}$.

Para uma mais fácil interpretação das Figuras 4.11 e 4.11 apresentam-se as Figuras 4.13, 4.14 e 4.15 relativas às secções eficazes do $^{165}\text{Ho}^{64+}$, do $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e do $^{181}\text{Ta}^{70+}$.

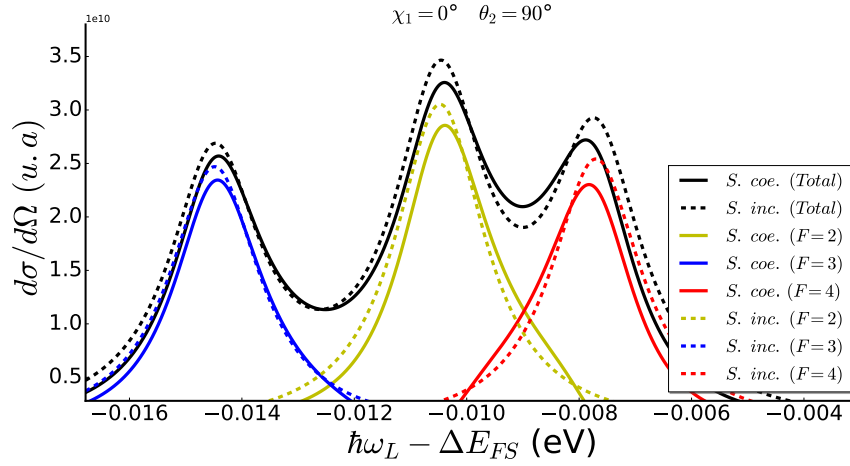


Figura 4.13: Soma dos termos coerentes (S. coe.) e incoerentes (S. inc.) da secção eficaz diferencial do $^{165}\text{Ho}^{64+}$.

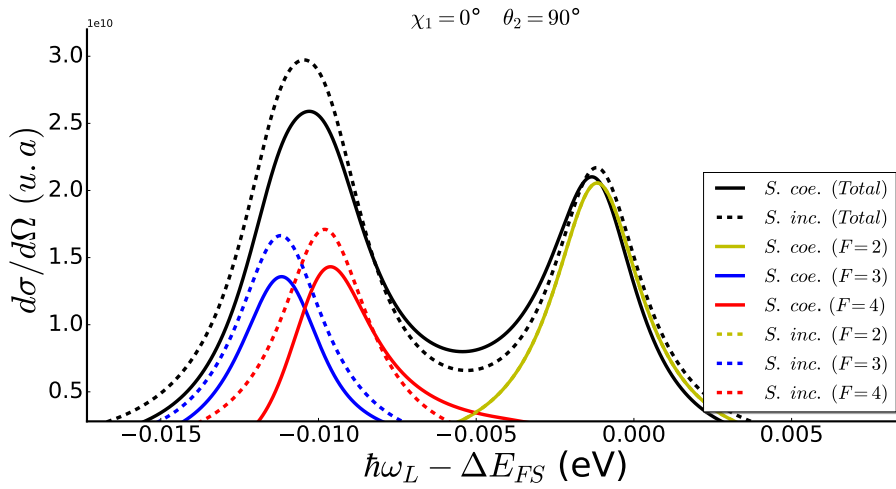


Figura 4.14: Soma dos termos coerentes (S. coe.) e incoerentes (S. inc.) da secção eficaz diferencial do $^{175}\text{Lu}^{68+}$.

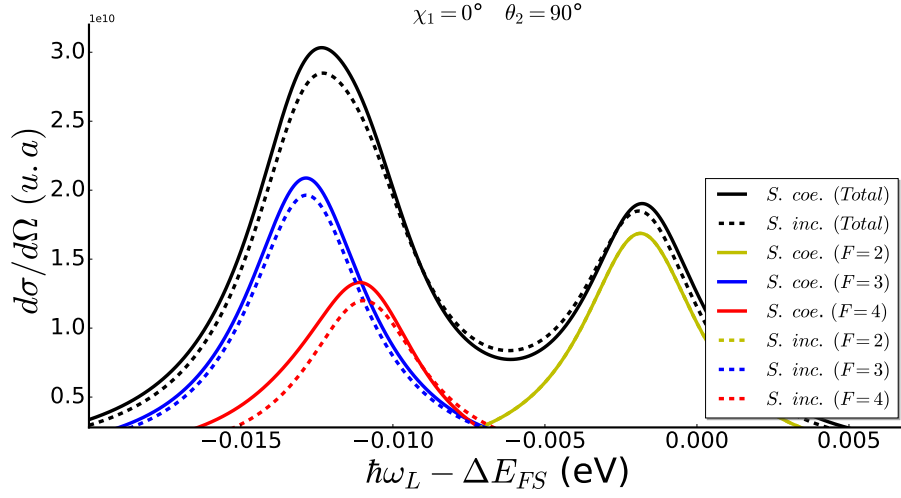


Figura 4.15: Soma dos termos coerentes (S. coe.) e incoerentes (S. inc.) da secção eficaz diferencial do $^{181}\text{Ta}^{70+}$.

Para a ressonância ($F = 2$), no caso do $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e do $^{181}\text{Ta}^{70+}$ verifica-se pela análise conjunta das Figuras 4.11, 4.12, 4.14 e 4.15 que a distância de ($F = 2$) relativamente a ($F = 3$) e ($F = 4$) é superior a largura a meia altura destas transições. Sendo os desvios de IQ observados aproximadamente nulos. Em oposição, no caso do $^{165}\text{Ho}^{64+}$ observa-se que o perfil de linha de ($F = 2$) é interceptado pelas ressonâncias ($F = 3$) e ($F = 4$) resultando num desvio máximo de 4.5% da largura a meia altura para a ressonância ($F = 2$).

Para a ressonância ($F = 3$), no caso do $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e do $^{181}\text{Ta}^{70+}$ observa-se uma intercepção de ($F = 3$) com ($F = 4$), no entanto o desvio de IQ para a ressonância ($F = 3$) é aproximadamente nulo em ambos os casos. Para o $^{165}\text{Ho}^{64+}$ a distância de ($F = 3$) relativamente a ($F = 2$) e ($F = 4$) é superior a largura a meia altura, contudo observa-se um desvio de IQ de 2.7% da largura a meia altura para a ressonância ($F = 3$).

Para a ressonância ($F = 4$), observam-se desvios de IQ para $^{165}\text{Ho}^{64+}$, para o $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e para o $^{181}\text{Ta}^{70+}$. Nomeadamente para o $^{165}\text{Ho}^{64+}$ o desvio de IQ da ressonância ($F = 4$) é de -6.4%, para o $^{175}\text{Lu}^{68+}$ o desvio de IQ da ressonância ($F = 4$) é de 5.4% e para o $^{181}\text{Ta}^{70+}$ o desvio de IQ da ressonância ($F = 4$) é de 6.5% da largura a meia altura.

Para o $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e para o $^{181}\text{Ta}^{70+}$ a energia de separação entre ressonâncias é aproximadamente a mesma, no entanto a largura a meia altura das ressonâncias do $^{181}\text{Ta}^{70+}$ é superior a largura a meia altura das ressonâncias do $^{175}\text{Lu}^{68+}$, observando-se que para todas as ressonâncias os desvios de IQ tomam maiores valores para o $^{181}\text{Ta}^{70+}$. Este resultado está em acordo com a regra de variação dos desvios de IQ dada em [1]

$$\bar{\delta}_{\text{QI}} \sim \frac{\Gamma^2}{|\omega_{F=\nu} - \omega_{F=n\nu}|} . \quad (4.8)$$

A expressão (4.8) permite estimar a variação da ordem de grandeza dos desvios de interferência quântica entre duas ressonâncias ($F = \nu$) e ($F = n\nu$) com uma largura a meia altura Γ , no entanto não se identifica uma regra geral que permita estimar os desvios de IQ. Um caso concreto desta dificuldade de estimar *a priori* os desvios de IQ são as ressonâncias ($F = 3$) e ($F = 4$) do $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e do $^{181}\text{Ta}^{70+}$ que apresentam uma energia de separação menor que a largura a meia altura mas os desvios de IQ são aproximadamente nulos. As ressonâncias ($F = 3$) e ($F = 4$) do $^{175}\text{Lu}^{68+}$ e do $^{181}\text{Ta}^{70+}$ sugerem assim um limite de proximidade entre ressonâncias que a partir do qual os desvios de IQ são nulos, no entanto os resultados obtidos neste trabalho não representam uma amostra suficientemente significativa por forma apresentar-se qualquer tipo de conclusão. Seria assim interessante em estudos futuros explorar-se a análise deste limite de proximidade.

4.4 Efeitos de interferência quântica em ressonâncias energeticamente distantes

A Figura 4.16 apresenta os resultados relativos aos efeitos de interferência quântica na secção eficaz diferencial relativista do $^{151}\text{Eu}^{60+}$, os respectivos desvios de interferência quântica são apresentados na Tabela 4.3.

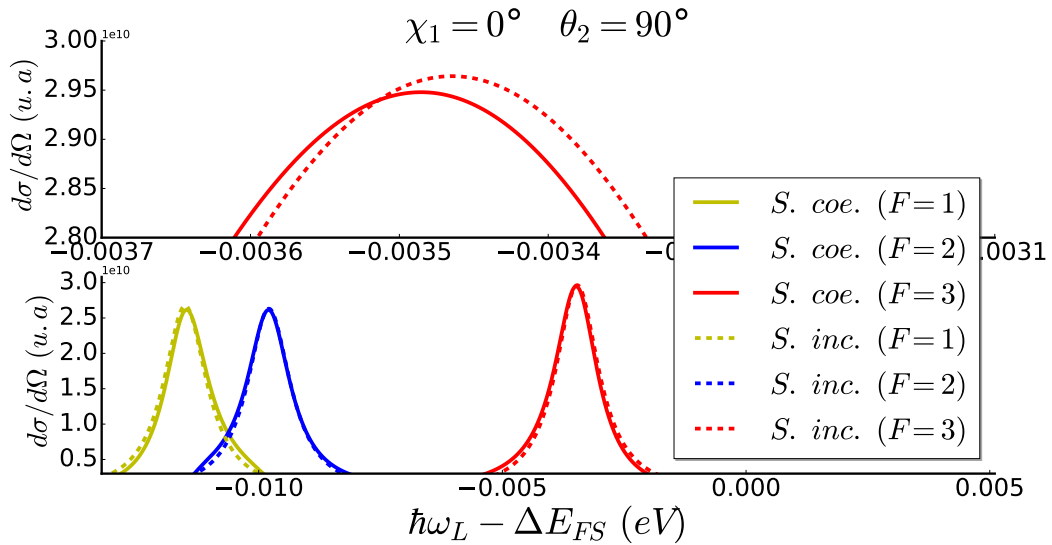


Figura 4.16: Soma dos termos coerentes (S. coe.) e incoerentes (S. inc.) da secção eficaz diferencial do $^{151}\text{Eu}^{60+}$.

A análise conjunta da Tabela 4.3 e da Figura 4.16 permite concluir que os efeitos de interferência quântica podem causar os desvios das energias de ressonância para estados da estrutura hiperfina considerados distantes.

4.4. EFEITOS DE INTERFERÊNCIA QUÂNTICA EM RESSONÂNCIAS ENERGÉTICAMENTE DISTANTES

Tabela 4.3: Desvios de IQ ($\bar{\delta}_{QI}$) na secção eficaz diferencial do do $^{151}\text{Eu}^{60+}$ correspondentes a parametrização da Tabela 4.1.

ν	Relativista				Não Relativista			
	Soma Coerente		Soma Incoerente		Soma Coerente		Soma Incoerente	
	$\bar{\delta}_{QI}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\perp}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\perp}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\perp}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\parallel}(\%)$	$\bar{\delta}_{QI}^{\perp}(\%)$
$F = 1$	2.7	-1.3	0.0	0.0	2.7	-1.3	0.0	0.0
$F = 2$	-0.6	0.2	0.0	0.0	-0.6	0.2	0.0	0.0
$F = 3$	-1.9	0.2	0.0	0.0	-1.9	1.0	0.0	0.0

Os desvios de IQ $\bar{\delta}_{QI}(\%)$ apresentados são relativos a Γ .

Por forma a definir e contextualizar o que neste trabalho se considera um estado energeticamente distante, apresenta-se em seguida a Tabela 4.4 relativa à caracterização da largura a meia altura e energia de separação da estrutura hiperfina do $^{151}\text{Eu}^{60+}$.

Tabela 4.4: Caracterização da estrutura hiperfina do $^{151}\text{Eu}^{60+}$. As diferenças de energia são calculadas tendo como referência o estado de menor energia $2s_{1/2}(F = 2)$, Γ representa a largura a meia altura aproximada do decaimento, $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ e ΔE_{FS} representa a diferença de energia entre os níveis $2p_{3/2}$ e $2s_{1/2}$.

	Energia (eV)	Ref.
$2s_{1/2}(F = 2)$	0	[35]*
$2s_{1/2}(F = 3)$	220.0×10^{-3}	[35]*
$2p_{3/2}(F = 1)$	880.763	[24]
$2p_{3/2}(F = 2)$	880.765	[24]
$2p_{3/2}(F = 3)$	880.771	[24]
$2p_{3/2}(F = 4)$	880.787	[24]
Γ	1079.0×10^{-6}	[44]
ΔE_{FS}	880.775	[44]

*Calculado segundo a Eq.(3.2) com os parâmetros de [35].

Utilizando os valores presentes na Tabela 4.4 verifica-se que o valor da razão entre a energia de separação dos estados da estrutura hiperfina ($F = 3$) e ($F = 2$), e a largura a meia altura é $5.56 \gg 1$. Também pela Figura 4.16 constata-se que a energia de separação entre os estados da estrutura hiperfina ($F = 2$) e ($F = 3$) é superior a largura a meia altura da transição $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$. Por este motivo, os estados da estrutura hiperfina ($F = 3$) e ($F = 2$) são considerados distantes. No entanto, verifica-se pela Tabela 4.3 que o desvio de interferência quântica para ($F = 3$) é superior ao desvio de interferência quântica para ($F = 2$). Este resultado inicialmente pouco intuitivo, no sentido em que esperar-se-ia um maior efeito de interferência quântica para estados energeticamente próximos. Ou seja, esperar-se-ia um maior efeito de interferência quântica para ($F = 2$) relativamente a ($F = 3$) uma vez que estes dois estados são energeticamente mais próximos. Contudo e apesar deste resultado pouco intuitivo, verifica-se que estes desvios de IQ em ressonâncias energeticamente distantes foram já identificados em estudos anteriores [31, 45].

4.5 Contribuição dos diferentes termos multipolares na amplitude da secção eficaz diferencial

O $^{151}\text{Eu}^{60+}$ tem um momento angular nuclear ($I = 5/2$), por este motivo a estrutura hiperfina do nível $2p_{3/2}$ é composta por ($F = 1, F = 2, F = 3, F = 4$). No entanto, a transição

$$2s_{1/2}^{F=2} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=4}, \quad (4.9)$$

não é identificável na secção eficaz do $^{151}\text{Eu}^{60+}$. A transição indicada na expressão 4.9 corresponde a uma transição quadripolar magnética, a análise da Figura 4.17 permite concluir que os termos relativos às transições quadripolares magnéticas são aproximadamente nulos ao longo de toda a sequência isoelectrónica do lítio.

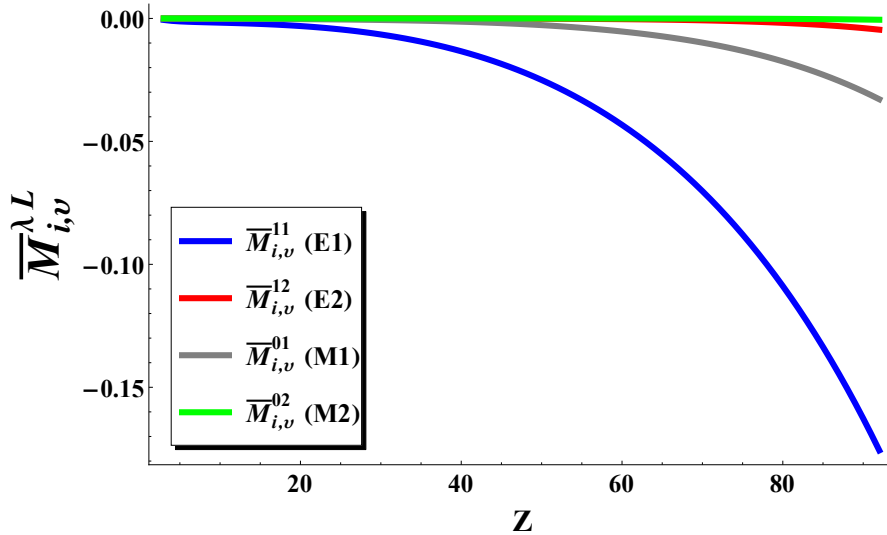


Figura 4.17: Amplitude dos elementos de matriz radiais relativistas $M_{fi}^{\lambda,L}$ ao longo da sequência isoelectrónica do lítio considerado uma transição $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$. Estes elementos de matriz foram calculados através das equações (2.44) e (2.45) .

Por este motivo, a contribuição deste multipolo para a secção eficaz diferencial é também aproximadamente nula. Conclui-se assim que no contexto deste trabalho, os termos multipolares eléctricos e magnéticos de segunda ordem não contribuem para o acréscimo dos efeitos de interferência quântica.

4.6 Validade e correcção do cálculo realizado

O cálculo realizado na presente dissertação teve como base um método analítico, onde as energias e as larguras a meia altura das transições em estudo foram obtidas das referências [24, 35, 44]. Por sua vez, os valores referenciados em [24, 35, 44] são também resultados teóricos, não sendo apresentado uma estimativa da ordem de grandeza da incerteza associada. Porém, considerando a expressão (3.8) a incerteza do cálculo realizado provém principalmente da incerteza da largura a meia altura.

Por este motivo, os resultados obtidos no presente trabalho devem ser entendidos como um estudo comparativo e não como um cálculo quantitativo exacto. Além do mais, não se identificou na literatura disponível nenhum estudo experimental sobre os efeitos de IQ em iões altamente carregados, por este motivo não foi possível realizar uma análise comparativa entre os resultados teóricos e experimentais.

No entanto, por forma a realizar-se uma análise comparativa com a referência [2], onde são apresentados os efeitos de interferência quântica para o ${}^7\text{Li}$ e ${}^6\text{Li}$, calcularam-se neste trabalho os desvios de interferência quântica para o ${}^7\text{Li}$. Dos resultados obtidos do ${}^7\text{Li}$ verificou-se um desvio das energias de ressonância entre 2.0% e 9.6% da largura a meia altura do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$, o que corresponde a um desvio em energia entre 116.5 kHz e 0.5 MHz. Estes valores são concordantes com os resultados obtidos na referência [2] tendo em conta a ordem de grandeza da incerteza indicada no artigo [2].

4.7 Relevância dos efeitos de interferência quântica na secção eficaz diferencial do ${}^{209}\text{Bi}^{80+}$

A discussão dos efeitos de interferência quântica na secção eficaz diferencial do ${}^{209}\text{Bi}^{80+}$ é particularmente relevante devido aos estudos realizados com este ião [13, 21, 46, 47, 48]. Dos artigos de referência supracitados, destaca-se a referência [48], onde se mediu experimentalmente a energia de separação da estrutura hiperfina do estado ($1s^2 2s^1$) do ${}^{209}\text{Bi}^{80+}$, através das transições

$$2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}^{F=4},$$

e

$$2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}^{F=5}.$$

Através da energia de separação da estrutura hiperfina do estado ($1s^2 2s^1$) estimou-se na referência [48] a contribuição dos termos relativos à teoria EDQ. Com o objectivo de avaliar a relevância dos efeitos de IQ no contexto da medição realizada na referência [48], recalcularam-se os desvios de interferência quântica do ${}^{209}\text{Bi}^{80+}$ com base no valor da largura a meia altura referenciada em [48].

Tabela 4.5: Tabela comparativa dos valores de referência da largura a meia altura e da energia de transição ΔE_{FS} ($2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$) do ${}^{209}\text{Bi}^{80+}$.

ΔE_{FS} (eV)	Γ (eV)	Ref.
2795.56	0.0188061	[44]
2788.14 (± 0.04)	0.0177059	[48]

Verificou-se que utilizando os valores da largura a meia altura e energia da transição ΔE_{FS} ($2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$) referenciados em [48] obtém-se o mesmo valor do desvio máximo de interferência quântica de 5.7 % da largura a meia altura para ($F = 3$). Este valor máximo do desvio de interferência quântica de 5.7 % corresponde a uma energia de 0.001 (eV). Apresenta-se na Tabela 4.6 uma análise comparativa entre a ordem de grandeza dos desvios de interferência quântica e a ordem de grandeza das contribuições da teoria EDQ em transições

$$2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2} ,$$

Tabela 4.6: Análise comparativa entre a ordem de grandeza dos desvios de interferência quântica e a ordem de grandeza das contribuições da teoria EDQ em transições $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ do $^{209}\text{Bi}^{80+}$.

Contribuição	Valor (eV)	Ref.
Desvios de IQ	0.001	Valor calculado no presente trabalho
EDQ	0.003	[48]
Correlação electrónica	0.002	[48]

Conclui-se assim que os efeitos de interferência quântica são da mesma ordem de grandeza das contribuições relativas à correcção EDQ e correlação electrónica em transições $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ do $^{209}\text{Bi}^{80+}$. Não é possível realizar uma comparação directa entre os estudos dos efeitos de interferência quântica realizados nesta dissertação e o estudo realizado na referência [48], uma vez que o estudo realizado na referência [48] não foi realizado através de espectroscopia *laser*. No entanto, fica assim demonstrado a importância da análise dos efeitos de interferência quântica em futuros estudos da contribuição EDQ por intermédio de espectroscopia *laser* em transições

$$2p_{3/2}^{F=F_i} \rightarrow 2s_{1/2}^{F=F_f} ,$$

de iões altamente carregados do tipo lítio.

Conclusões finais 5

Neste trabalho realizou-se o cálculo computacional dos efeitos de interferência quântica para transições entre níveis da estrutura hiperfina

$$2s_{1/2}^{F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F_v} \rightarrow 2s_{1/2}^{F_f},$$

em iões altamente carregados da sequência isoelectrónica do lítio. O cálculo computacional realizado foi implementado com base num modelo de dispersão elástico a dois fótons. A expressão utilizada para o da cálculo secção eficaz diferencial deriva de uma matriz de dispersão de segunda ordem. Os elementos de matriz associados à expressão da secção eficaz diferencial foram calculados através de uma expansão multipolar que inclui os termos multipolares eléctricos e magnéticos de primeira e segunda ordem. A dependência angular da secção eficaz diferencial foi realizada por intermédio da parametrização angular dada na referência [1]. Os coeficientes relativos à esta parametrização foram obtidos através da reestruturação de um código previamente desenvolvido no âmbito do estudo apresentado na referência [1]. O cálculo da secção eficaz diferencial e dos desvios de interferência quântica foram realizados por intermédio de rotinas desenvolvidas em ambiente Python.

Concluiu-se que os desvios de interferência quântica são mensuráveis para os casos em estudo. O desvio de IQ máximo foi observado no $^{181}\text{Ta}^{70+}$, correspondendo a este máximo um valor de 6.5% da largura a meia altura da transição em estudo. Os resultados obtidos mostram que os desvios de interferência quântica são independentes do carácter relativista dos iões altamente carregados.

Adicionalmente, verificou-se que os efeitos de interferência quântica em estudo dependem da geometria do processo de dispersão. E que com uma escolha do ângulo de dispersão e do ângulo de polarização é possível anular os efeitos de interferência quântica em estudo neste trabalho. Por último, verificou-se que os efeitos de interferência quântica das transições em estudo neste trabalho podem ser da ordem de grandeza da contribuição de EDQ destas mesmas transições. Por este motivo, a análise dos efeitos de interferência quântica deve ser considerada em futuras investigações experimentais das contribuições de EDQ por meio de espectroscopia *laser* de alta resolução em iões altamente carregados da sequência isoelectrónica do lítio.

Bibliografia

- [1] P. Amaro, B. Franke, J. J. Krauth, M. Diepold, F. Fratini, L. Safari, J. Machado, A. Antognini, F. Kottmann e P. Indelicato *et al.* “Quantum interference effects in laser spectroscopy of muonic hydrogen, deuterium, and helium- 3 ”. Em: *Physical Review A* 92.2 (2015), p. 022514.
- [2] R. C. Brown, S. Wu, J. Porto, C. J. Sansonetti, C. Simien, S. M. Brewer, J. N. Tan e J. Gill. “Quantum interference and light polarization effects in unresolvable atomic lines: Application to a precise measurement of the 6, 7 Li D 2 lines”. Em: *Physical Review A* 87.3 (2013), p. 032504.
- [3] P. Amaro, F. Fratini, L. Safari, A. Antognini, P. Indelicato, R. Pohl e J. P. Santos. “Quantum interference shifts in laser spectroscopy with elliptical polarization”. Em: *Physical Review A* 92.6 (2015), p.062506.
- [4] D. F. Winters, M Vogel, D. Segal, R. Thompson e W Nörtershäuser. “Laser spectroscopy of hyperfine structure in highly charged ions: a test of QED at high fields”. Em: *Canadian Journal of Physics* 85.5 (2007), p. 403–408.
- [5] Z. Andjelkovic, S. Bharadia, B. Sommer, M. Vogel e W. Nörtershäuser. “Towards high precision in-trap laser spectroscopy of highly charged ions”. Em: *Hyperfine Interactions* 196.1 (2010), p. 81–91.
- [6] S. Epp, J. C. López-Urrutia, G Brenner, V Mäckel, P. Mokler, R Treusch, M Kuhlmann, M. Yurkov, J Feldhaus e J. Schneider *et al.* “Soft X-ray laser spectroscopy on trapped highly charged ions at FLASH”. Em: *Physical review letters* 98.18 (2007), p. 183001.
- [7] R. Thompson. “High resolution laser spectroscopy of atomic systems”. Em: *Reports on Progress in Physics* 48 (1985), p. 531–578.
- [8] M. Quack. “Frontiers in spectroscopy”. Em: *Faraday discussions* 150 (2011), p. 533–565.
- [9] J. Ye, H. Schnatz e L. W. Hollberg. “Optical frequency combs: from frequency metrology to optical phase control”. Em: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 9.4 (2003), p. 1041–1058.
- [10] J. D. Gillaspay. “Highly charged ions”. Em: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34.19 (2001), p. 93.
- [11] M. A. Levine, R. Marrs, J. Henderson, D. Knapp e M. B. Schneider. “The electron beam ion trap: A new instrument for atomic physics measurements”. Em: *Physica Scripta* 1988.T22 (1988), p. 157.
- [12] R Geller. “ECRIS -The electron cyclotron resonance ion sources”. Em: *Annual Review of Nuclear and Particle Science* 40.1 (1990), p. 15–44.

- [13] O. Postavaru, Z. Harman e C. H. Keitel. “High-precision metrology of highly charged ions via relativistic resonance fluorescence”. Em: *Physical review letters* 106.3 (2011), p. 033001.
- [14] S Schmidt, C. Geppert e Z Andelkovic *et al.* “Laser spectroscopy methods for probing highly charged ions at GSI”. Em: *Hyperfine Interactions* 227.1-3 (2014), p. 29–43.
- [15] V. P. Krainov e M. B. Smirnov. “Cluster beams in the super-intense femtosecond laser pulse”. Em: *Physics reports* 370.3 (2002), p. 237–331.
- [16] M. Safronova, V. Dzuba, V. Flambaum, U. Safronova, S. Porsev e M. Kozlov. “Highly charged ions for atomic clocks, quantum information, and search for α variation”. Em: *Physical review letters* 113.3 (2014), p. 030801.
- [17] P Beiersdorfer. “Highly charged ions in magnetic fusion plasmas: research opportunities and diagnostic necessities”. Em: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 48.14 (2015), p. 144017.
- [18] N. L. D’Cruz, C. L. Sarazin e J. Dubau. “Excitation of the 3.071 nm Hyperfine Line in Li-like ^{57}Fe in Astrophysical Plasmas”. Em: *The Astrophysical Journal* 501.1 (1998), p. 414.
- [19] P. M.D. G. Amaro. “Study of forbidden transitions in atomic systems”. Tese de Doutorado. Faculdade de Ciências e Tecnologia - Universidade Nova de Lisboa, 2012.
- [20] D Feili, P. Bosselmann, K. Schartner, P. Mokler, X Ma, A. Livingston, F Folkmann e E Träbert. “Access to Two-Photon QED Contributions via $2s\ ^2S_{1/2} \rightarrow 2p\ ^2P_{1/2}$ Transitions in Heavy Li-Like Ions”. Em: *Physica Scripta* 2001.92 (2001), p. 300.
- [21] A. Volotka, D. Glazov, O. Andreev, V. Shabaev, I. Tupitsyn e G Plunien. “Test of many-electron QED effects in the hyperfine splitting of heavy high-Z ions”. Em: *Physical review letters* 108.7 (2012), p. 073001.
- [22] O. Y. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien e D. A. Soloviyev. “QED theory of the spectral line profile and its applications to atoms and ions”. Em: *Physics Reports* 455.4 (2008), p. 135–246.
- [23] A. Volotka, D. Glazov, O. Andreev, V. Shabaev, I. Tupitsyn e G Plunien. “Test of many-electron QED effects in the hyperfine splitting of heavy high-Z ions”. Em: *Physical review letters* 108.7 (2012), p. 073001.
- [24] E. Korzinin, N. Oreshkina e V. Shabaev. “Hyperfine Splitting of Low-Lying Levels in Heavy Li-Like Ions”. Em: *Physica Scripta* 71.5 (2005), p. 464.
- [25] P Beiersdorfer, H Chen, D. Thorn e E Träbert. “Measurement of the two-loop lamb shift in lithiumlike U^{89+} ”. Em: *Physical review letters* 95.23 (2005), p. 233003.
- [26] H. Backe. “Precision spectroscopy at heavy ion ring accelerator SIS 300”. Em: *Hyperfine Interactions* 171.1-3 (2006), p. 93–107.
- [27] W. Henning. “FAIR-an international accelerator facility for research with ions and antiprotons”. Em: *High Intensity and High Brightness Hadron Beams*. Vol. 773. 2005, p. 3–5.
- [28] D Winters, T Beck, G Birkel, C Dimopoulou, V Hannen, T. Kühl, M Lochmann, M Loeser, X Ma e F Nolden *et al.* “Laser cooling of relativistic heavy-ion beams for FAIR”. Em: *Physica Scripta* 2015.166 (2015), p. 014048.
- [29] J. Stenflo. “Quantum interferences, hyperfine structure, and Raman scattering on the Sun.” Em: *Astronomy and Astrophysics* 324 (1997), p. 344–356.

-
- [30] L. Jiguang e D. Chenzhong. “Interference Effects in Hyperfine Induced $2s2p\ ^3P_0 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ Transitions of Be-like Ions”. Em: *Plasma Science and Technology* 12.3 (2010), p. 364.
 - [31] M Horbatsch e E. Hessels. “Shifts from a distant neighboring resonance”. Em: *Physical Review A* 82.5 (2010), p. 052519.
 - [32] A Marsman, M Horbatsch e E. Hessels. “Shifts due to distant neighboring resonances for laser measurements of $2\ ^3S_1 \rightarrow 2\ ^3P_J$ transitions of helium”. Em: *Physical Review A* 86.4 (2012), p.040501.
 - [33] R. Pohl, A. Antognini, F. Nez, F. D. Amaro, F. Biraben, J. M. Cardoso, D. S. Covita, A. Dax, S. Dhawan e L. M. Fernandes *et al.* “The size of the proton”. Em: *Nature* 466.7303 (2010), p. 213–216.
 - [34] R. B. Miles, W. R. Lempert e J. N. Forkey. “Laser rayleigh scattering”. Em: *Measurement Science and Technology* 12.5 (2001), p. 33.
 - [35] V. Shabaev, M. Shabaeva, I. Tupitsyn, V. Yerokhin, A. Artemyev, T. Kühl, M Tomaselli e O. Zherebtsov. “Transition energy and lifetime for the ground-state hyperfine splitting of high-Z lithiumlike ions”. Em: *Physical Review A* 57.1 (1998), p. 149.
 - [36] G. B. Rybicki e A. P. Lightman. “Radiative processes in astrophysics”. Book. John Wiley & Sons, 2008.
 - [37] W. R. Johnson. “Atomic structure theory: lectures on atomic physics”. Book. Springer Science, 2007.
 - [38] L. Labzowsky, A. Nefiodov, G Plunien, G Soff e D Liesen. “Hyperfine Structure of Highly Charged $^{238}_{92}\text{U}$ Ions with Rotationally Excited Nuclei”. Em: *Physical review letters* 84.5 (2000), p. 851.
 - [39] E Träbert, P Beiersdorfer, G. Brown, J Clementson, D. Thorn, M. Chen, K. Cheng e J Sapirstein. “Hyperfine splitting of the $2s_{1/2}$ and $2p_{1/2}$ levels in lithium-like Pr^{56+} ”. Em: *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 583. 1. IOP Publishing. 2015, p. 012039.
 - [40] T. Jahrsetz. “Two-photon processes in highly charged ions”. Dissertation. Combined Faculties of the Natural Sciences e Mathematics of the Ruperto-Carola-University of Heidelberg, 2015.
 - [41] L. Safari, P. Amaro, S. Fritzsche, J. P. Santos, S. Tashenov e F. Fratini. “Relativistic polarization analysis of Rayleigh scattering by atomic hydrogen”. Em: *Physical Review A* 86.4 (2012), p. 043405.
 - [42] S. Goldman e G. W. Drake. “Relativistic two-photon decay rates of $2s_{1/2}$ hydrogenic ions”. Em: *Physical Review A* 24.1 (1981), p. 183.
 - [43] R. W. Cheary, A. A. Coelho e J. P. Cline. “Fundamental parameters line profile fitting in laboratory diffractometers”. Em: *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* 109.1 (2004), p. 1.
 - [44] C. E. Theodosiou, L. J. Curtis e M. El-Mekki. “Calculations of $2p$ lifetimes in the Li sequence”. Em: *Physical Review A* 44.11 (1991), p. 7144.
 - [45] M Horbatsch e E. Hessels. “Shifts from a distant neighboring resonance for a four-level atom”. Em: *Physical Review A* 84.3 (2011), p.032508.
 - [46] D. F. Winters, M Vogel, D. Segal e Thompson. “Laser spectroscopy of hyperfine structure in highly charged ions: a test of QED at high fields”. Em: *Canadian Journal of Physics* 85.5 (2007), p. 403–408.

- [47] V. Yerokhin, P Indelicato e V. Shabaev. “Nonperturbative calculation of the two-loop lamb shift in Li-like ions”. Em: *Physical review letters* 97.25 (2006), p. 253004.
- [48] P Beiersdorfer, A. Osterheld, J. Scofield, J. C. López-Urrutia e K Widmann. “Measurement of QED and Hyperfine Splitting in the $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ X-Ray Transition in Li-like $^{209}\text{Bi}^{80+}$ ”. Em: *Physical review letters* 80.14 (1998), p. 3022.

Apêndice - Caracterização da estrutura hiperfina A

A.1 $^{165}\text{Ho}^{64+}$

Tabela A.1: Caracterização da estrutura hiperfina do $^{165}\text{Ho}^{64+}$. As diferenças de energia são calculadas tendo como referência o estado de menor energia $2s_{1/2}(F = 3)$, Γ representa a largura a meia altura aproximada do decaimento, $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ e ΔE_{FS} representa a diferença de energia entre os níveis $2p_{3/2}$ e $2s_{1/2}$.

	Energia (eV)	Ref.
$2s_{1/2}(F = 3)$	0	[*]
$2s_{1/2}(F = 4)$	329.6×10^{-3}	[*]
$2p_{3/2}(F = 2)$	1124.435	[24]
$2p_{3/2}(F = 3)$	1124.430	[24]
$2p_{3/2}(F = 4)$	1124.437	[24]
$2p_{3/2}(F = 5)$	1124.465	[24]
Γ	1936.0×10^{-6}	[44]
ΔE_{eV}	1124.445	[44]

*Calculado segundo a Eq.(3.2) com os parâmetros de [35].

A.2 $^{175}\text{Lu}^{68+}$

Tabela A.2: Caracterização da estrutura hiperfina do $^{175}\text{Lu}^{68+}$. As diferenças de energia são calculadas tendo como referência o estado de menor energia $2s_{1/2}(F=3)$, Γ representa a largura a meia altura aproximada do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. ΔE_{FS} representa a diferença de energia entre os níveis $2p_{3/2}$ e $2s_{1/2}$.

	Energia (eV)	Ref.
$2s_{1/2}(F=3)$	0	[35]*
$2s_{1/2}(F=4)$	229.8×10^{-3}	[35]*
$2p_{3/2}(F=2)$	1425.309	[24]
$2p_{3/2}(F=3)$	1425.299	[24]
$2p_{3/2}(F=4)$	1425.301	[24]
$2p_{3/2}(F=5)$	1425.326	[24]
Γ	3464.2×10^{-6}	[44]
ΔE_{FS}	1425.310	[44]

*Calculado segundo a Eq.(3.2) com os parâmetros de [35].

A.3 $^{181}\text{Ta}^{70+}$

Tabela A.3: Caracterização da estrutura hiperfina do $^{181}\text{Ta}^{70+}$. As diferenças de energia são calculadas tendo como referência o estado de menor energia $2s_{1/2}(F=3)$, Γ representa a largura a meia altura aproximada do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. ΔE_{FS} representa a diferença de energia entre os níveis $2p_{3/2}$ e $2s_{1/2}$.

	Energia (eV)	Ref.
$2s_{1/2}(F=3)$	0	[35]*
$2s_{1/2}(F=4)$	278.8×10^{-3}	[35]*
$2p_{3/2}(F=2)$	1601.104	[24]
$2p_{3/2}(F=3)$	1601.093	[24]
$2p_{3/2}(F=4)$	1601.095	[24]
$2p_{3/2}(F=5)$	1601.124	[24]
Γ	4701.490×10^{-6}	[44]
ΔE_{FS}	1601.106	[44]

*Calculado segundo a Eq.(3.2) com os parâmetros de [35].

A.4 $^{185}\text{Re}^{75+}$

Tabela A.4: Caracterização da estrutura hiperfina do $^{185}\text{Re}^{72+}$. As diferenças de energia são calculadas tendo como referência o estado de menor energia $2s_{1/2}(F = 2)$, Γ representa a largura a meia altura aproximada do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. ΔE_{FS} representa a diferença de energia entre os níveis $2p_{3/2}$ e $2s_{1/2}$.

	Energia (eV)	Ref.
$2s_{1/2}(F = 2)$	0	[35]*
$2s_{1/2}(F = 3)$	449.9×10^{-3}	[35]*
$2p_{3/2}(F = 1)$	1796.107	[24]
$2p_{3/2}(F = 2)$	1796.103	[24]
$2p_{3/2}(F = 3)$	1796.109	[24]
$2p_{3/2}(F = 4)$	1796.141	[24]
Γ	5983.7×10^{-6}	[44]
ΔE_{FS}	1796.119	[44]

*Calculado segundo a Eq.(3.2) com os parâmetros de [35].

A.5 $^{209}\text{Bi}^{80+}$

Tabela A.5: Caracterização da estrutura hiperfina do $^{209}\text{Bi}^{80+}$. As diferenças de energia são calculadas tendo como referência o estado de menor energia $2s_{1/2}(F = 4)$, Γ representa a largura a meia altura aproximada do decaimento $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$. ΔE_{FS} representa a diferença de energia entre os níveis $2p_{3/2}$ e $2s_{1/2}$.

	Energia (eV)	Ref.
$2s_{1/2}(F = 4)$	0	[35]*
$2s_{1/2}(F = 5)$	929.0×10^{-3}	[35]*
$2p_{3/2}(F = 3)$	2796.029	[24]
$2p_{3/2}(F = 4)$	2796.050	[24]
$2p_{3/2}(F = 5)$	2796.074	[24]
$2p_{3/2}(F = 6)$	2796.099	[24]
Γ	18806.0×10^{-6}	[44]
ΔE_{FS}	2796.069	[44]

*Calculado segundo a Eq.(3.2) com os parâmetros de [35].

Apêndice - Coeficientes de parametrização angular B

B.1 $^{165}\text{Ho}^{64+}$

Tabela B.1: Coeficientes de parametrização de Λ e Ξ para transições $2s_{1/2}^{F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F_v}$ do $^{165}\text{Ho}^{64+}$.

F_i	F_v	F_{nv}	a_0^{NR}	a_2^{NR}	b_2^{NR}	a_0^{R}	a_2^{R}	b_0^{R}	b_2^{R}
3	2	2	0.972	-0.0278	0	35.6	-1.01	0	0
3	2	3	0.972	-0.0278	0	35.6	-1.01	0	0
3	2	4	0.972	-0.0278	-0.625	35.6	-1.01	-1.11×10^{-2}	-22.8
3	2	5	0.972	-0.0278	0	35.6	-1.01	0	0
3	3	2	1.02	-0.255	-0.292	37.3	-9.32	-9.35×10^{-3}	-10.6
3	3	3	1.02	-0.255	0	37.3	-9.32	0	0
3	3	4	1.02	-0.255	-0.219	37.3	-9.32	3.53×10^{-3}	-7.99
3	3	5	1.02	-0.255	0	37.3	-9.32	-1.60×10^{-2}	1.60×10^{-2}
3	4	2	0.729	0.0573	0	26.7	2.10	0	0
3	4	3	0.729	0.0573	0	26.7	2.10	0	0
3	4	4	0.729	0.0573	0	26.7	2.10	0	0
3	4	5	0.729	0.0573	0	26.7	2.10	-1.60×10^{-2}	1.60×10^{-2}

B.2 $^{181}\text{Ta}^{70+}$

 Tabela B.2: Coeficientes de parametrização de Λ e χ para transições $2s_{1/2}^{F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F_v}$ do $^{181}\text{Ta}^{70+}$.

F_i	F_v	F_{nv}	a_0^{NR}	a_2^{NR}	b_2^{NR}	a_0^{R}	a_2^{R}	b_0^{R}	b_2^{R}
3	2	2	0.972	-0.0278	0	38.1	-1.08	0	0
3	2	3	0.972	-0.0278	0	38.1	-1.08	0	0
3	2	4	0.972	-0.0278	0	38.1	-1.08	0	0
3	2	5	0.972	-0.0278	0	38.1	-1.08	0	0
3	3	2	1.02	-0.255	-0.292	40.0	-9.97	-1.37×10^{-2}	-11.4
3	3	3	1.02	-0.255	0	40.0	-9.97	0	0
3	3	4	1.02	-0.255	-0.219	40.0	-9.97	5.18×10^{-3}	-8.55
3	3	5	1.02	-0.255	0	40.0	-9.97	-2.34×10^{-2}	2.35×10^{-2}
3	4	2	0.729	0.0573	-0.625	28.6	2.25	-1.63×10^{-2}	-24.4
3	4	3	0.729	0.0573	0	28.6	2.25	0	0
3	4	4	0.729	0.0573	0	28.6	2.25	0	0
3	4	5	0.729	0.0573	0	28.6	2.25	-2.34×10^{-2}	2.35×10^{-2}

B.3 $^{175}\text{Lu}^{68+}$

 Tabela B.3: Coeficientes de parametrização de Λ e Ξ para transições $2s_{1/2}^{F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F_v}$ do $^{175}\text{Lu}^{68+}$.

F_i	F_v	F_{nv}	a_0^{NR}	a_2^{NR}	b_2^{NR}	a_0^{R}	a_2^{R}	b_0^{R}	b_2^{R}
3	2	2	0.972	-0.0278	0	37.5	-1.07	0	0
3	2	3	0.972	-0.0278	0	37.5	-1.07	0	0
3	2	4	0.972	-0.0278	0	37.5	-1.07	0	0
3	2	5	0.972	-0.0278	0	37.5	-1.07	0	0
3	3	2	1.02	-0.255	-0.292	39.3	-9.81	-1.21×10^{-2}	-11.2
3	3	3	1.02	-0.255	0	39.3	-9.81	0	0
3	3	4	1.02	-0.255	-0.219	39.3	-9.81	4.58×10^{-3}	-8.42
3	3	5	1.02	-0.255	0	39.3	-9.81	-2.08×10^{-2}	2.08×10^{-2}
3	4	2	0.729	0.0573	-0.625	28.1	2.21	-1.44×10^{-2}	-24.0
3	4	3	0.729	0.0573	0	28.1	2.21	0	0
3	4	4	0.729	0.0573	0	28.1	2.21	0	0
3	4	5	0.729	0.0573	0	28.1	2.21	-2.08×10^{-2}	2.08×10^{-2}

B.4 $^{185}\text{Re}^{72+}$ Tabela B.4: Coeficientes de parametrização de Λ e Ξ para transições $2s_{1/2}^{F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F_v}$ do $^{185}\text{Re}^{72+}$.

F_i	F_v	$F_{v'}$	a_0^{NR}	a_2^{NR}	b_2^{NR}	a_0^{R}	a_2^{R}	b_0^{R}	b_2^{R}
2	1	1	0.417	-0.00417	0	16.5	-1.64×10^{-1}	0	0
2	1	2	0.417	-0.00417	0	16.5	-1.64×10^{-1}	0	0
2	1	3	0.417	-0.00417	-0.311	16.5	-1.64×10^{-1}	-9.73×10^{-3}	-12.3
2	1	4	0.417	-0.00417	0	16.5	-1.64×10^{-1}	0	0
2	2	1	0.540	-0.135	-0.0972	21.4	-5.33	-5.32×10^{-3}	-3.83
2	2	2	0.540	-0.135	0	21.4	-5.33	0	0
2	2	3	0.540	-0.135	-0.173	21.4	-5.33	2.60×10^{-3}	-6.82
2	2	4	0.540	-0.135	0	21.4	-5.33	-1.30×10^{-2}	1.30×10^{-2}
2	3	1	0.432	0.0259	0	17.1	1.03	0	0
2	3	2	0.432	0.0259	0	17.1	1.03	0	0
2	3	3	0.432	0.0259	0	17.1	1.03	0	0
2	3	4	0.432	0.0259	0	17.1	1.03	-1.63×10^{-2}	1.63×10^{-2}

B.5 $^{209}\text{Bi}^{80+}$ Tabela B.5: Coeficientes de parametrização de Λ e Ξ para transições $2s_{1/2}^{F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F_v}$ do $^{209}\text{Bi}^{80+}$.

F_i	F_v	F_{nv}	a_0^{NR}	a_2^{NR}	b_2^{NR}	a_0^{R}	a_2^{R}	b_0^{R}	b_2^{R}
4	3	3	1.75	-0.0729	0	70.2	-2.91	0	0
4	3	4	1.75	-0.0729	-0.578	70.2	-2.91	-4.55×10^{-2}	-23.0
4	3	5	1.75	-0.0729	-1.03	70.2	-2.91	-4.42×10^{-2}	-41.0
4	3	6	1.75	-0.0729	0	70.2	-2.91	0	0
4	4	3	1.65	-0.404	0	66.2	-16.1	0	0
4	4	4	1.65	-0.404	0	66.2	-16.1	0	0
4	4	5	1.65	-0.404	-0.264	66.2	-16.1	1.38×10^{-2}	-10.6
4	4	6	1.65	-0.404	0	66.2	-16.1	-6.71×10^{-2}	6.72×10^{-2}
4	5	3	1.10	0.0953	0	44.1	3.83	0	0
4	5	4	1.10	0.0953	0	44.1	3.83	0	0
4	5	5	1.10	0.0953	0	44.1	3.83	0	0
4	5	6	1.10	0.0953	0	44.1	3.83	-5.87×10^{-2}	5.89×10^{-2}

Apêndice - Rotinas

Matematica[®] C

C.1 Rotina *Deltafunc*

A rotina *Deltafunc* calcula o termo

$$4\pi[J_v]\sqrt{\frac{[F_f, F_v, F_i, J_f, J_i]}{[L_2, L_1]}} \begin{pmatrix} J_f & L_2 & J_v \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & L_1 & J_v \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} F_f & L_2 & F_v \\ J_v & I & J_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} F_i & L_1 & F_v \\ J_v & I & J_i \end{Bmatrix} .(C.1)$$

C.3 Rotina - OmegaDra

A rotina *OmegaDra* calcula a quantidade expressa na equação (2.43) da página 19. Esta rotina é composta por quatro ciclos, os dois primeiros ciclos percorrem todas as combinações das multipolaridades (eléctrica e magnética) do fóton incidente com o fóton emitido. Os dois últimos ciclos dizem respeito a ordem multipolar da expansão do fóton incidente com o fóton emitido. A variável condicional (*modo relativista*) indica se os elementos de matriz radiais ($\bar{M}_{fv}^{L_1\lambda_1} \bar{M}_{iv}^{L_2\lambda_2}$) são calculados considerando o carácter relativista dos iões altamente carregados. Quando a variável condicional é falsa (*modo relativista*= 0), os elementos de matriz radiais ($\bar{M}_{fv}^{L_1\lambda_1} \bar{M}_{iv}^{L_2\lambda_2}$) anteriormente mencionados são dados pela aproximação não-relativista. Os elementos de matriz radiais ($\bar{M}_{iv}^{\lambda L}$) têm como parâmetro de entrada as energias dos estados excitados ressonantes ω_{iv} e não-ressonantes ω_{inv} , sendo estas energias expressas em unidades atómicas.

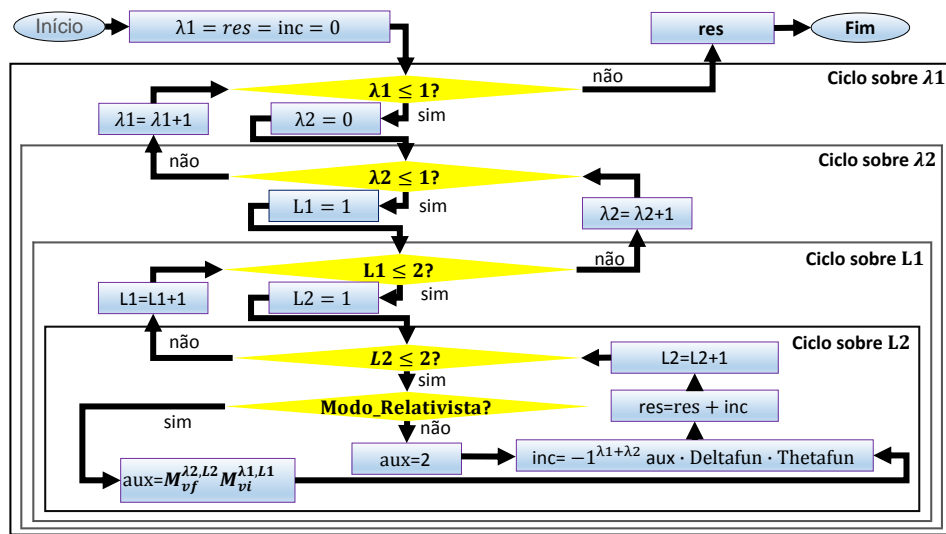


Figura C.2: Fluxograma rotina - *OmegaDra*.

C.4 Rotinas - *LambdafunDrake* e *XifunDrake*

A rotina *LambdafunDrake* calcula a soma dos termos incoerentes (Λ) dados pela equação (2.50) através das ressonâncias directas (ω_v) associadas às transições ressonantes. Enquanto que a rotina *XifunDrake* calcula a soma dos termos de interferência quântica (Ξ) dados pela equação (2.51) através das ressonâncias (ω_v) e (ω_{nv}) associadas às transições cruzadas entre estados ressonantes e não-ressonantes. Ambas as funções são compostas por quatro ciclos, os três primeiros ciclos produzem todas as combinações possíveis da projecção do número quântico orbital total do sistema de partículas relativo à soma do momento angular total electrónico com o momento angular total nuclear, dados dois estados definidos por F_i e F_f . O último subciclo corresponde às diferentes polarizações do fóton emitido.

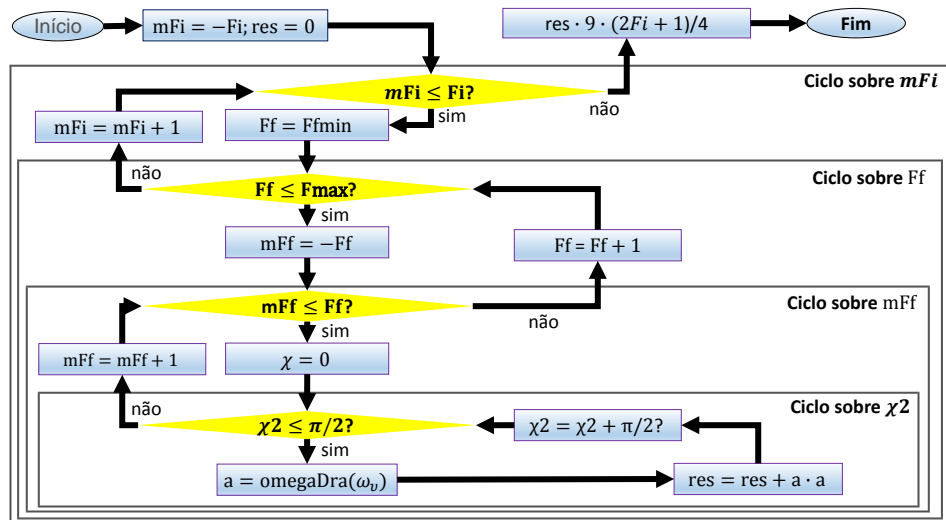
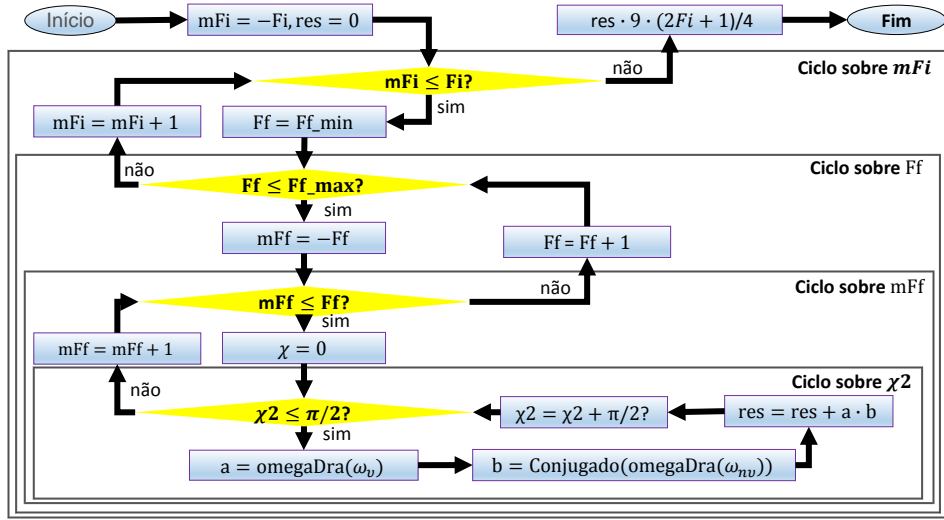
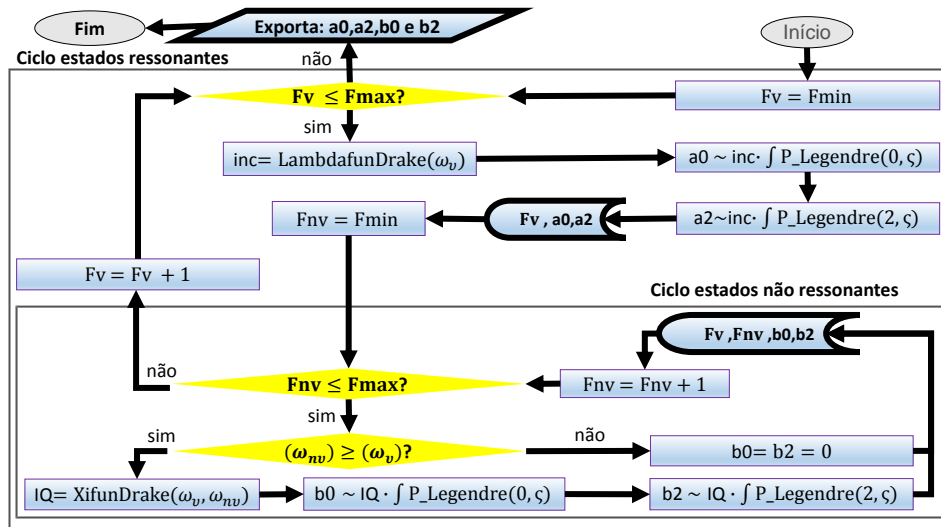


Figura C.3: Fluxograma rotina - *LambdafunDrake*

Figura C.4: Fluxograma da rotina - *XifunDrake*.

C.5 Rotina *Tablecoef*

A rotina *Tablecoef* é composta por um ciclo principal que percorre todos os estados ressonantes que por sua vez, inclui um subciclo sobre todos os estados não-ressonantes. Para cada ciclo associado a um estado ressonante calculam-se os coeficientes a_0 , a_2 . De forma semelhante, para cada subciclo sobre as transições não-ressonantes calculam-se os coeficientes b_0 e b_2 . Após o cálculo de cada coeficiente a_n e b_n estes são guardados numa base de dados em conjunto com os números quânticos do estado inicial (i), do estado excitado ressonante (v) e do estado excitado não-ressonante (nv) da transição em estudo.

Figura C.5: Fluxograma da rotina- *Tablecoef*.

Apêndice - Base de dados D

Apresenta-se em seguida modelo relacional da base de dados que se implementou em SQL. Este modelo relacional é constituído por um conjunto de tabelas e relações, onde cada linha de uma tabela representa uma entidade, sendo que cada entidade é identificada univocamente por uma chave primária. Deste modo cada linha da tabela (*ION*) representa um diferente ião e cada coluna representa uma propriedade da entidade (*ION*). As diferentes tabelas relacionam-se através de um conjunto de chaves estrangeiras, sendo uma chave estrangeira uma propriedade que referencia uma linha numa outra tabela. O diagrama do modelo relacional da base de dados desenvolvida encontra-se representado na Figura D.1.

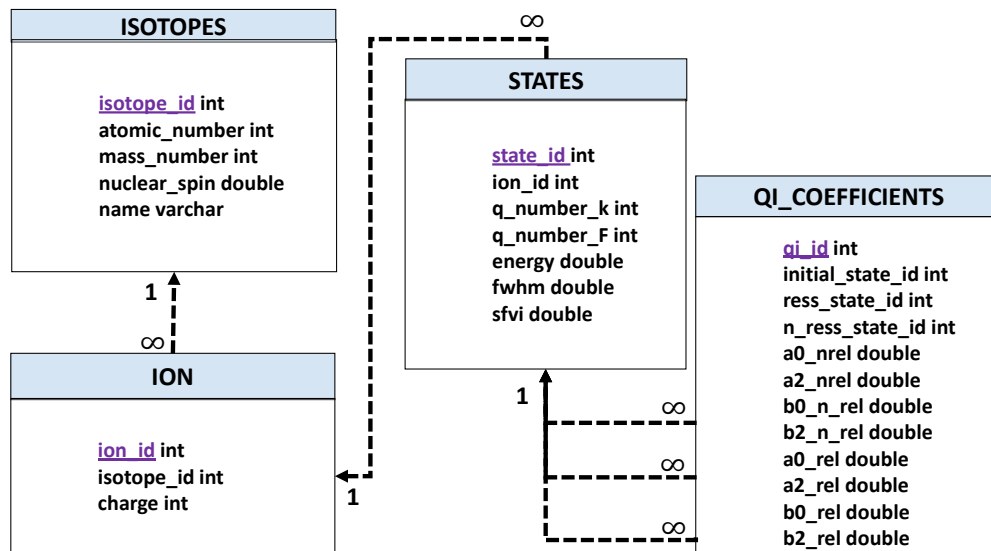


Figura D.1: Diagrama do modelo relacional da base de dados implementada em SQL. As chaves primárias estão representadas a roxo e a sublinhado. As setas pretas tracejadas representam uma participação total.

D.1 Tabelas

- *ISOTOPES* (isotope id, atomic number, mass number, nuclear spin, name) - guarda a informação de cada isótopo, tem como chave primária *isotope id*.
- *ION* (ion id, isotope id, charge) - guarda a informação de cada ião, tem como chave primária *ion id*, *isotope id* é chave estrangeira que referencia a tabela *ISOTOPES*.
- *STATES* (state id, ion id, charge, q number k, q number F, energy, fwhm, sfvi) - guarda a informação de cada estado de energia, tem como chave primária *state id*, *ion id* é chave estrangeira que referencia a tabela *ION*.
- *QI COEFFICIENTS* (qi id, F_i id, F_v id, F_{nv} id, a_0 nrel, a_2 nrel, b_0 nrel, b_2 nrel, a_0 rel, a_2 rel, b_0 rel, b_2 rel) - guarda a informação relativa à parametrização dos termos incoerentes e dos termos de interferência quântica, tem como chave primária *qi id*, F_i id é chave estrangeira que referencia a tabela *STATES* associada ao estado inicial, F_{nv} id é chave estrangeira que referencia a tabela *STATES* associada ao estado não-ressonante, F_v id é chave estrangeira que referencia a tabela *STATES* relativa aos estados ressonantes.

D.2 Relações

- Relação *ION Belongs ISOTOPE*, relação do tipo muitos para um, sendo que vários iões estão para um único isótopo. A entidade *ION* tem participação total na relação *ION Belongs ISOTOPES*, ou seja, qualquer ião tem que estar necessariamente associado a um isótopo.
- Relação *STATE Belongs ION*, relação do tipo muitos para um, sendo que vários estados de energia estão para um único ião. A entidade *STATES* tem participação total na relação *STATE Belongs ION*, ou seja, qualquer estado de energia tem que estar necessariamente associado a um ião.
- Relação *QI COEFFICIENTS of STATE*, relação do tipo muitos para um, sendo que vários coeficientes de parametrização estão para um único estado de energia. A entidade *QI COEFFICIENTS* tem participação total na relação *QI COEFFICIENTS of STATE*, ou seja, qualquer coeficiente de parametrização tem que estar necessariamente associado a um estado inicial e a um estado ressonante.

Apêndice - Rotinas Python E

E.1 Função - CrossSection

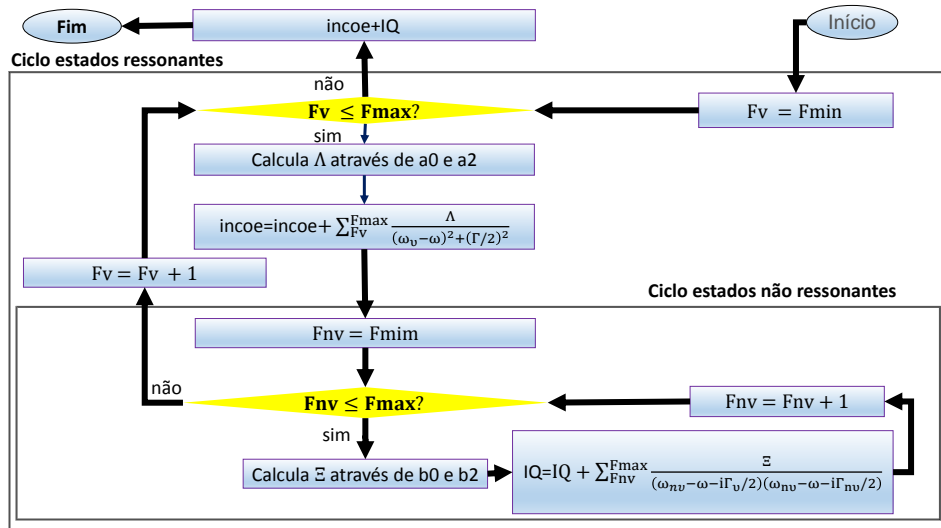


Figura E.1: Fluxograma da rotina - CrossSection.

Como resultado da rotina *CrossSection* obtém-se:

- A soma incoerente total (S. inc. Total) que representa a secção eficaz diferencial de todas as transições ressonantes e não inclui a soma dos termos de interferência quântica.
- A soma coerente total (S. coe. Total) que representa a secção eficaz diferencial de todas as transições ressonantes e inclui a soma dos termos de interferência quântica.
- A soma incoerente de uma única ressonância (S. inc. $F = F_v$) que representa apenas a secção eficaz diferencial da transição $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_v}$ e não inclui a soma dos termos de interferência quântica.
- A soma coerente de uma única ressonância (S. coe. $F = F_v$) que representa apenas a secção eficaz diferencial da transição $2s_{1/2}^{F=F_i} \rightarrow 2p_{3/2}^{F=F_v}$ e inclui a soma dos termos de interferência quântica.

E.2 Função - *ShiftCrossSec*

O passo de cada ciclo da rotina *ShiftCrossSec* é dado por (Γ/points) , sendo que *points* representa o número de pontos pelo qual se divide a largura a meia altura (Γ). *fitCrosSec* é o espectro da secção eficaz diferencial e é obtido directamente da função *CrossSection*.

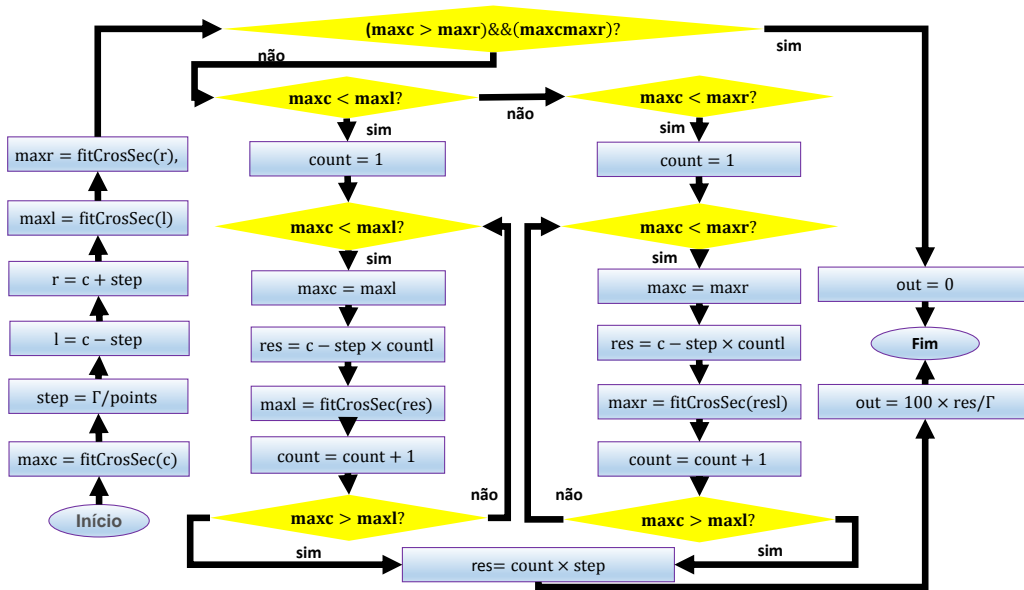


Figura E.2: Fluxograma da rotina - *ShiftCrossSec*.